现代应用数学丛书

# 回转群和对称群的应用

〔日〕山内恭彦 堀江久 著

上海科学技术出版社

現代应用数学丛书

# 回转群和对称群的应用

〔日〕山内恭彦
堀江 久 著

張 质 賢 譯
宫 学 惠 校

上海科学技术出版社

## 內容提要

本书是日本岩波书店出版的現代应用数学丛书之一的中譯本。全书共分3章。第1章緒論，說明了 Hamilton 函数对一次变換群的不变性、群元的算符的性质及連續群的无穷算符的定义。第2章回轉群的应用，介紹回轉群的表象，張量运算及回轉群在多粒子問題中的应用。第3章对称群的应用，前几节介紹对称群的基本事项，后几节叙述对称群在原子、原子核的殼层結构以及量子力学中的对称問題方面的应用。本书可供高等院校师生以及研究工作者参考。

現代应用数学丛书

回转群和对称群的应用

原书名　回轉群および対称群の応用
原著者　〔日〕山内恭彥　堀江久
原出版者　岩波书店，1958
譯者　張质賢
校者　宮学惠

*

上海科学技术出版社出版
(上海瑞金二路450号)
上海市书刊出版业营业许可証出093号
新华书店上海发行所发行　各地新华书店經售
商务印书館上海厂印刷

*

开本850×1168 1/32　印張8 13/32　字数82,000
1962年12月第1版　1962年12月第1次印刷
印数 1—3,500

統一书号：13119·490
定　价：(十四) 0.62元

# 出版說明

这一套书是根据日本岩波书店出版的"現代应用数学讲座"翻譯而成。日文原书共15卷60册，分成A、B两組，各編有序号。現在把原来同一題目分成两册或三册的加以合并，整理成42种，不另分組編号，陆續翻譯出版。

这套书涉及的面很广，其內容都和現代科学技术密切有关，有一定参考价值。每一本书收集的資料都比較丰富，而敘述扼要，篇幅不多，有利于讀者以較短时間掌握有关学科的主要內容。虽然，这套书的某些观点不尽适合于我国的情况，但其方法可供参考。因此，翻譯出版这一套书，对我国学术界是有所助益的。

由于日文原书是1957年起以讲座形式陆續出版的，写作时間和篇幅的限制不可避免地会影响原作者对內容的处理，为了尽可能地减少这种影响，我們在每一譯本中，特請譯者或校閱者撰写序或后記，以介紹有关学科的最近发展状况，并对全书內容作一些評价，提出一些看法，結合我国情况补充一些資料文献，在文內过于簡略或不足的地方添加了必要的注釋和改正原书中存在的一些錯誤。希望这些工作能对讀者有所帮助。

承担翻譯和校閱的同志，为提高书籍的质量付出了巨大劳动，在此特致以誠摯的謝意。

欢迎讀者对本书提出批評和意見。

上海科学技术出版社

# 現代应用数学丛书

| 书名 | 原作者 | 譯者 |
| --- | --- | --- |
| 代数学* | 弥永昌吉等 | 熊全淹 |
| 几何学* | 矢野健太郎 | 孙澤瀛 |
| 复变函数 | 功力金二郎 | 刘书琴 |
| 集合·拓扑·测度* | 河田敬义 | 賴英华 |
| 泛函分析* | 吉田耕作 | 程其襄 |
| 广义函数* | 岩村联 | 楊永芳 |
| 常微分方程* | 福原满洲雄 | 張庆芳 |
| 偏微分方程* | 南云道夫 | 錢端壮 |
| 特殊函数* | 小谷正雄等 | 錢端壮 |
| 差分方程* | 福田武雄 | 穆鸿基 |
| 富里哀变换与拉普拉斯变换* | 河田龙夫 | 錢端壮 |
| 变分法及其应用* | 加藤敏夫 | 周怀生 |
| 李群論* | 岩堀長庆 | 孙澤瀛 |
| 随机过程* | 伊藤清 | 刘璋温 |
| 回轉群与对称群的应用* | 山内恭彦等 | 張质賢 |
| 結晶統計与代数* | 伏見康治 | 孙澤瀛 |
| 偏微分方程的应用 | 犬井鉄郎等 | 楊永芳 |
| 微分方程的近似解法 | 加藤敏夫等 | 王占瀛 |
| 数值計算法 | 森口繁一等 | 閻昌龄 |
| 量子力学中的数学方法* | 朝永振一郎 | 周民强 |
| 工程力学系統* | 近藤一夫等 | 刘亦珩 |
| 非綫性振动論* | 古屋茂 | 吕紹明 |
| 力学系与映射理論* | 岩田义一 | 孙澤瀛 |
| 平面彈性論* | 森口繁一 | 刘亦珩 |
| 有限变位彈性論*<br>变形几何学 | 山本善之<br>近藤一夫 | 刘亦珩 |
| 塑性論* | 鷲津久一郎 | 刘亦珩 |
| 粘性流体理論* | 谷一郎 | 刘亦珩 |
| 可压縮流体理論* | 河村龙馬 | 刘亦珩 |
| 网絡理論 | 喜安善市等 | 賈弃誉 |
| 自动控制理論* | 喜安善市等 | 翟立林 |
| 回路拓扑学 | 近藤一夫 | 張鳴鏞 |
| 信息論* | 喜安善市等 | 李文湉 |
| 推断統計理論 | 北川敏男 | 李賢平 |
| 統計分析* | 森口繁一 | 刘璋温 |
| 实驗設計 | 增山元三郎 | 刘璋温 |
| 群体遺傳学的数学理論* | 木村資生 | 刘祖洞 |
| 博奕論 | 官澤光一 | 張毓春 |
| 綫性規划 | 森口繁一 | 刘源張 |
| 經济理論中的数学方法 | 安井琢磨等 | 談祥柏 |
| 随机过程的应用* | 河田龙夫 | 刘璋温 |
| 計算技术 | 高桥秀俊 | 姚晋 |
| 穿孔卡計算机 | 森口繁一 | 刘源張 |

注：有 * 者已在 1962 年出版。

# 目 录

# 第1章 緒　論

## §1 緒　言

我們都知道，原子的稳定状态，是用表示总角动量 $\mathbf{J}$ 的大小的量子数 $j$ 来标志的。$|\mathbf{J}|$ = 一定，是有心力場中的运动的特征，这不外乎是古典力学中的 Kepler 第二定律的推广。这种特性是由力場对圍繞着中心 O 旋轉的不变性而得来的。对于作用于粒子的力場，如果对于粒子的坐标的某种变换群不变时，則必有相当于运动方程的积分的量存在，在量子力学里，可以用表示积分的量的数值来确定稳定状态。于是这样的量，可以用群的不可約表象賦予特征（正如量子数 $j$ 与 $2j+1$ 阶的回轉群相对应）。本編的目的就是把这样的問題，用各种群来加以系統的处理，使它对解决量子力学問題起一定的作用。

## §2 使 Hamilton 函数不变的群

根据量子力学理論知道，由 $n$ 个粒子构成的系統的稳定状态，由 Schrödinger 方程

$$H\psi = E\psi \tag{2.1}$$

来决定。这里 $H$ 是系統的总能量（动能＋位能）的算符：

$$H = -\hbar^2 \sum \frac{\Delta_k}{2m_k} + U(x_1, y_1, z_1, \cdots, x_n, y_n, z_n), \tag{2.2}$$

并且称为 Hamilton 函数。$x_k, y_k, z_k$ $(k=1, 2, \cdots, n)$ 是第 $k$ 个粒子的坐标，$\Delta_k$ 表示算符，即

$$\Delta_k = \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2}, \tag{2.3}$$

$\psi=\psi(x_1, y_1, z_1, \cdots, x_n, y_n, z_n)$是方程(2.1)滿足适当边界条件的解，$E$ 是使这样的解存在而采取的特定的数值，$\psi$, $E$ 分别称为算符 $H$ 的本征函数(或本征矢量)与本征值。在物理学中，$E$是系統可能具有的能量的数值，有离散的，也有連續的。以下就是对某种特定的本征值 $E$ 来加以考察。

在本編里所要叙述的，是当粒子的坐标 $x_1, y_1, z_1, \cdots, x_n, y_n, z_n$ 經过某种变换时，$H$ 的表达式不变的情况。

对于各个粒子的坐标变换 (2.3)：$\Delta=|\text{grad}|^2$ 具有与矢量模的平方相同的变换规則。另一方面，在沒有外場作用时，位能 $U$ 只与粒子間的相互作用有关，故可由粒子的相对坐标决定。因此 $H$ 与坐标原点及坐标軸方向的选取无关，所以 $H$ 的形式不因坐标系的平行移动 $T$ 而变更：

$$
\begin{aligned}
&T_x:\ x'_k=x_k+a_1, \quad T_y:\ y'_k=y_k+a_2,\\
&T_z:\ z'_k=z_k+a_3, \quad (a_1,\ a_2,\ a_3\ \text{为常数}),
\end{aligned}
\tag{2.4}
$$

也不因繞 $x$, $y$, $z$ 軸的回轉 $R$ 而变更：

$$
\begin{aligned}
&R_x:\begin{cases} y'_k=y_k\cos\varphi_1+z_k\sin\varphi_1,\\ z'_k=-y_k\sin\varphi_1+z_k\cos\varphi_1,\end{cases}\\
&R_y:\begin{cases} z'_k=z_k\cos\varphi_2+x_k\sin\varphi_2,\\ x'_k=-z_k\sin\varphi_2+x_k\cos\varphi_2,\end{cases}\\
&R_z:\begin{cases} x'_k=x_k\cos\varphi_3+y_k\sin\varphi_3,\\ y'_k=-x_k\sin\varphi_3+y_k\cos\varphi_3\end{cases}\\
&\qquad(\varphi_1,\ \varphi_2,\ \varphi_3\ \text{为常数}).
\end{aligned}
\tag{2.5}
$$

如果构成系統的粒子全部都是相同的，例如对于 $n$ 个电子的集团，因为 $m_1=m_2=\cdots=m_n=m$，对粒子編号的改变，即相当于 $1, 2, \cdots, n$ 的置换 $P\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & n\\ 1' & 2' & \cdots & n'\end{pmatrix}$的坐标变换

$$
x'_k=x_{k'}, \quad y'_k=y_{k'}, \quad z'_k=z_{k'}
\tag{2.6}
$$

是使 $H$ 不变的。这些使 $H$ 不变的变换称为“粒子系所許可的变

换”。

对于原子問題，以原子核所在位置O为力場的中心，若认为原子核不属于粒子系統，則由O所生成的力場，对于电子系統是以O为对称中心的外場，其平行移动$T$不是許可变换，只有圍繞O的回轉$R$是許可变换。对于二原子的分子，可以假定两个不动的原子核位于$z$軸上，因为外場对称于$z$軸，只有$R_z$是許可变换。若令原子核是由$Z$个质子（編号为$1, 2, \cdots, Z$）与$N$个中子（編号为$Z+1, \cdots, Z+N$）所构成的，在数字$n=N+Z$的置换中，只有$1, 2, \cdots, Z$間的置换与$Z+1, \cdots, Z+N$間的置换是許可的（暂且把质子和中子看作不同的粒子）。

这些使$H$不变的粒子坐标的一次变换集合构成群$G$。若$S_1$，$S_2$使$H$不变，它們的合成变换$S=S_1S_2$也使$H$不变（满足群公理的証明很簡单，故略）。把粒子的坐标一个一个用$(x_1, y_1, z_1, \cdots, x_n, y_n, z_n)$写出来很麻煩，所以把它用一个字$X$来表示（也可以看成以$x_1, y_1, z_1, \cdots, z_n$为分量的$3n$維空間的矢量）。于是，象(2.4)，(2.5)，(2.6)的一次变换可以写为

$$X'=SX. \tag{2.7}$$

这样就可以把$S$作为群$G$中元素的記号来使用。

## §3 对应于群元素的算符

前节的(2.7)是使$H$不变的变换，而

$$\psi'(x_1', y_1', z_1', \cdots, x_n', y_n', z_n')=\psi(x_1, y_1, z_1, \cdots, x_n, y_n, z_n), \tag{3.1}$$

即

$$\psi'(X')=\psi'(SX)=\psi(X), \tag{3.2}$$

对应于这个变换，可以定义一个函数，即

$$\psi'(X)=\psi(S^{-1}X), \tag{3.3}$$

这就规定了由函数 $\psi(X)$ 导出 $\psi'(X)$ 的演算，記为

$$\psi'(X)=S\psi(X). \tag{3.4}$$

$S$ 既具有群元素(对坐标 $X$ 的一次变换)的意义，又具有作用于 $\psi$ 的算符的意义。

用坐标 $X$ (以及关于 $X$ 的导数) 表示 Hamilton 函数 (2.2) 时，記为 $H_X$。$H$ 对 $S$ 的不变性，記为

$$H_{SX}=H_X \quad (S\in G). \tag{3.5}$$

因此又有(由于 $S^{-1}\in G$) $H_X=H_{S^{-1}X}$. 再利用(2.1)可得

$$\begin{aligned} H_X\psi'(X)&=H_X\psi(S^{-1}X)=H_{S^{-1}X}\psi(S^{-1}X)\\ &=E\psi(S^{-1}X)=E\psi'(x). \end{aligned} \tag{3.6}$$

上式表示 $\psi'(X)$ 是属于 $H$ 的本征值 $E$ 的本征函数。把这种关系用算符 $S$ 表示，即为

$$HS\psi=SH\psi=ES\psi, \tag{3.7}$$

这表明 $S$ 与 $H$ 为"可对易"：

$$HS=SH. \tag{3.8}$$

量子力学的意义是 $S$ 为"运动常量"，即"不随时間而变更"。

假定 $E$ 是 $f$ 重的本征值，而且 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_f$ 是它的綫性独立的本征函数系，则(2.1)的任意解，可以用綫性組合

$$\psi=x_1\psi_1+x_2\psi_2+\cdots+x_n\psi_n \tag{3.9}$$

来表示。即属于本征值 $E$ 的本征函数 $\psi_k$ $(k=1, 2, \cdots, f)$ 是 $H$ 的本征空間 $R(E)$ 的基底，$x_1, \cdots, x_f$ 是矢量 $\psi$ 的对于这些基底的分量。这些可以取为么正基底

$$(\psi_j, \psi_k)=\int\bar{\psi}_j\psi_k dV=\delta_{jk}. \tag{3.10}$$

由(3.7)可知 $\psi'_k=S\psi_k$ 是属于 $R(E)$ 的本征矢量，所以可用

$$\psi'_k=S\psi_k=\sum_l \psi_l a_{lk}(S) \tag{3.11}$$

来表示。于是决定了各个 $S\in G$ 的从基底 $\psi_k$ 到基底 $\psi'_k$ 的一次变

换。可以用下面的方法来說明这种变换是么正的。

設我們所考察的使 $H$ 不变的变换 $S$ 同时能使体积元素 $dV_X = dx_1dy_1dz_1\cdots dx_ndy_ndz_n$ 不变：

$$dV_{X'} = dV_{SX} = dV_X,$$

因而

$$\begin{aligned}(S\psi_j,\ S\psi_k) &= \int \overline{S\psi_j(X)}\, S\psi_k(X)\, dV_X \\ &= \int \overline{\psi}_j(S^{-1}X)\, \psi_k(S^{-1}X)\, dV_{S^{-1}X} \\ &= (\psi_j,\ \psi_k) = \delta_{jk}.\end{aligned} \tag{3.12}$$

所以从基底 $(\psi_1, \cdots, \psi_f)$ 到基底 $(\psi'_1, \cdots, \psi'_f)$ 的变换是么正变换。把这种在 $R(E)$ 内的一次变换記为 $A(S)$。

令 $S = S_2S_1$，則

$$S\psi_k = \sum_j \psi_j a_{jk}(S),$$

$$\begin{aligned}S_2S_1\psi_k &= S_2\sum_l \psi_l a_{lk}(S_1) = \sum_l S_2\psi_l a_{lk}(S_1) \\ &= \sum_{l,j} \psi_j a_{jl}(S_2)\, a_{lk}(S_1).\end{aligned}$$

于是

$$a_{jk}(S) = \sum_l a_{jl}(S_2)\, a_{lk}(S_1), \tag{3.13}$$

即对于 $S = S_2S_1$，有

$$A(S) = A(S_2)\, A(S_1) \tag{3.14}$$

的关系式成立。由此可知变换的集合 $\{A(S)\}$ $(S \in G)$ 是空間 $R(E)$ 中的群 $G$ 的表象 $D$。

令 $$\psi' = \sum x'_j\psi_j, \quad \psi = \sum x_k\psi_k,$$

又因 $$\psi' = S\psi = \sum_k x_k S\psi_k = \sum_{k,j} x_k\psi_j a_{jk},$$

所以，对于矢量 (3.9)，$\psi \in R(E)$，上面的变换可以用

$$x'_j = \sum a_{jk}x_k \tag{3.15}$$

的一次变换表示。

这样的表象，不能保証永久是不可約的。在例外的情况下，也有可約的(即所謂“偶然重合”)。但是，即使对一个 $H$ 是可約的，若使 $H$ 在群 $G$ 的許可范圍內变化，“偶然重合”可以消失，而分解为不可約的表象。因此在一般情况下，可以认为“表象 $D$ 是不可約的”(这是由經驗的事实得来的結論)。从而可以說“系統的各稳定状态或能級，可以用使 $H$ 不变的群的不可約表象 $D$ 来标志”。而群的不可約表象又可以用它的特征标来表明，所以又可說“系統的能級，可以用群的不可約表象的特征标 $\{\chi(S)\}$ 来标志”。如果能用比特征标更簡单的方法来决定不可約表象，那么当然更便利了。例如回轉群的不可約表象 $D$ 可以用它的阶数 $f=2j+1$ 来决定，所以 $D$ 可由数字 $j=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots$ 来唯一确定，記为 $D_j$。

## §4 对于連續群的无穷小算符

由(3.8)，已知对应于群 $G$ 中元素 $S$ 的算符 $S$ 是运动常量，但是 $S$ 是么正算符，而不是 Hermite 算符，所以 $S$ 不是物理量。也就是說，它的本征值不是用实数能表示的量。这样，使 $S$ 本身具有物理意义是困难的。但是如果 $G$ 是連續群，由考虑无穷小算符，就可以找出具有物理意义的量来。

現在考察連續群的元素可以用有限个参数表示的情况。例如平移群 $T(2.4)$ 的 $a_1$, $a_2$, $a_3$，回轉群 $R(2.5)$ 的 $\varphi_1$, $\varphi_2$, $\varphi_3$，就是属于这种情况。如果当参数 $t$ 有无穷小变化 $dt$ 时，与此对应的 $x_k$, $y_k$, $z_k$ 的变化为 $dx_k=\frac{dx_k}{dt}dt$, $dy_k=\frac{dy_k}{dt}dt$, $dz_k=\frac{dz_k}{dt}dt$，由于 $x'_k=x_k+dx_k$, $y'_k=y_k+dy_k$, $z'_k=z_k+dz_k$ 的逆变换为

$$x'_k=x_k-dx_k,\ y'_k=y_k-dy_k,\ z'_k=z_k-dz_k,$$

則按 $\psi(X)=\psi(x_k, y_k, z_k)$ 有

$$\psi' = \psi + d\psi = \psi(x_k - dx_k,\ y_k - dy_k,\ z_k - dz_k)$$
$$= \psi - \sum_k \left( \frac{\partial \psi}{\partial x_k} dx_k + \frac{\partial \psi}{\partial y_k} dy_k + \frac{\partial \psi}{\partial z_k} dz_k \right)$$
$$= \psi + C\psi dt.$$

这里 $C$ 是算符

$$C = -\sum_k \left( \frac{dx_k}{dt} \frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{dy_k}{dt} \frac{\partial}{\partial y_k} + \frac{dz_k}{dt} \frac{\partial}{\partial z_k} \right). \tag{4.1}$$

对于平移 $T_x$，由于 $x_k = x_k^0 + a_1$❶，所以 $t = a_1$，$\frac{dx_k}{dt} = \frac{dx_k}{da_1} = 1$。由(4.1)可得

$$C = -\sum_k \frac{\partial}{\partial x_k}. \tag{4.2}$$

同样，对于 $T_y$，$T_z$ 的无限小算符可以写为

$$C = -\sum_k \frac{\partial}{\partial y_k}, \quad C = -\sum_k \frac{\partial}{\partial z_k}. \tag{4.3}$$

对于回轉 $R_z$:

$$\begin{cases} x_k = x_k^0 \cos\varphi_3 + y_k^0 \sin\varphi_3, \\ y_k = -x_k^0 \sin\varphi_3 + y_k^0 \cos\varphi_3, \end{cases}$$

$$\frac{dx_k}{d\varphi_3} = -y_k, \quad \frac{dy_k}{d\varphi_3} = x_k, \tag{4.4}$$

所以 $R_z$ 的算符 $C$ 为

$$C = -\sum_k \left( x_k \frac{\partial}{\partial y_k} - y_k \frac{\partial}{\partial z_k} \right). \tag{4.5}$$

同样，$R_x$，$R_y$ 的算符 $C$ 为

$$C = -\sum_k \left( y_k \frac{\partial}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \right), \quad C = -\sum_k \left( z_k \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial z_k} \right). \tag{4.6}$$

由于在

$$(\psi, \psi) = \int \bar{\psi} \psi dV \tag{4.7}$$

---

❶ 把变换改写为 $x_k^0 \to x_k$ 的形式。

里，$dV$ 对 $S$ 是不变的，用与(3.12)同样的方法可以証明 $S$ 是么正算符。所以

$$\frac{d}{dt}(\psi, \psi)=\left(\frac{d\psi}{dt}, \psi\right)+\left(\psi, \frac{d\psi}{dt}\right)$$
$$=(C\psi, \psi)+(\psi, C\psi)=0.$$

又因为

$$(a\varphi, \psi)=\bar{a}(\varphi, \psi), \quad (\varphi, a\psi)=a(\varphi, \psi),$$

若令 $C=iQ$，則得

$$-i(Q\psi, \psi)+i(\psi, Q\psi)=0,$$

即
$$(Q\psi, \psi)=(\psi, Q\psi),$$

所以 $Q$ 是 Hermite 算符。对于 $T$, $R$ 則分別有

$$\left.\begin{aligned} p_x&=-i\sum\frac{\partial}{\partial x_k}, \\ p_y&=-i\sum\frac{\partial}{\partial y_k}, \\ p_z&=-i\sum\frac{\partial}{\partial z_k}, \end{aligned}\right\} \tag{4.8}$$

及

$$\left.\begin{aligned} L_x&=-i\sum_k\left(y_k\frac{\partial}{\partial z_k}-z_k\frac{\partial}{\partial y_k}\right), \\ L_y&=-i\sum_k\left(z_k\frac{\partial}{\partial x_k}-x_k\frac{\partial}{\partial z_k}\right), \\ L_z&=-i\sum_k\left(x_k\frac{\partial}{\partial y_k}-y_k\frac{\partial}{\partial x_k}\right). \end{aligned}\right\} \tag{4.9}$$

(4.8)，(4.9)的本征值都是实数的物理量。实际上，(4.8)是动量的 $x$, $y$, $z$ 的分量，(4.9) 是角动量的 $x$, $y$, $z$ 的分量，大家知道这些量都是一定的。

这样对于具有有限个参数的連續群，由导入无穷小算符，能使它与物理量对应。

# 第2章　回轉群的应用

## §5　回轉群的不可約表象

在一般情况下，表象空間（如§3中的$R(E)$）可分解为子空間$R'(E)$，$R''(E)$，若属于表象$D$的所有变换都使各个子空間不变，則称$D$为完全可約的。若令在$R'(E)$，$R''(E)$內的表象为$D'$，$D''$，則有

$$D=D'+D''\tag{5.1}$$

的关系式成立。象这样把$D$分解为两个表象的和称为把$D$簡約。如果$D$，$D'$还是完全可約的，則对它們再施行簡約，最后分解为不能再簡約的表象的和，即

$$D=D_1+D_2+\cdots+D_k.\tag{5.2}$$

簡約完全实行后所得的各个表象，叫不可約表象。这样把$D$簡約为不可約表象的和之后，再对表象空間的基底施以适当的一次变换，就可以象图(5.1)那样，表象矩陣$A(S)$的$k$个不可約成分矩陣沿对角綫排列，其他部分都是0。如(3.12)所示，我們所研究的量子力学系統的变换是么正的，也就是說，它的表象是么正的。因为任何么正表象都是完全可約的，所以我們所考虑的回轉群，平移群，置换群的任意表象$D$都是完全可約的，而且，可以象(5.2)那样簡約为不可約表象的和❶。

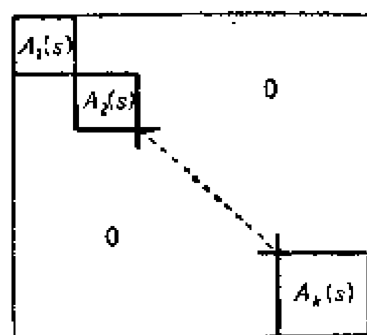


图　5.1

---

❶　关于回轉群的可約性的直接的証明，可参看山内恭彦著：回轉群及其表象（回轉群とその表現）（岩波）p. 77.

已經知道回轉群的任意表象，可以简約为不可約表象之和，以下的問題就是求出回轉群的不可約表象。为此我們先考虑在前节导出的角动量算符 $L_x$, $L_y$, $L_z$(4.9)。在这些角动量算符的成分之間，有下面的对易关系成立：

$$\left.\begin{array}{l}[L_x,\ L_y]=iL_z,\\ [L_y,\ L_z]=iL_x,\\ [L_z,\ L_x]=iL_y,\end{array}\right\} \tag{5.3}$$

这里 $[A, B]=AB-BA$。我們暂时把 $L_x$, $L_y$, $L_z$ 是由空間回轉导出的无穷小算符这件事忘記，而把滿足(5.3)对易关系的算符組当作一般的回轉群无穷小算符，把記号也改写为 $J_x$, $J_y$, $J_z$，再利用对易关系：

$$\left.\begin{array}{l}[J_x,\ J_y]=iJ_z,\\ [J_y,\ J_z]=iJ_x,\\ [J_z,\ J_x]=iJ_y\end{array}\right\} \tag{5.4}$$

来求回轉群的表象。为此，用 $J_x$, $J_y$, $J_z$ 还不如用

$$J_{\pm}=J_x\pm iJ_y,\quad J_z=J_z \tag{5.5}$$

較为便利。因为 $J_+$, $J_-$, $J_z$ 之間的对易关系是

$$[J_z,J_+]=J_+,\quad [J_+,J_-]=2J_z,\quad [J_-,J_z]=J_-, \tag{5.6}$$

与(5.4)相比較，第一式中只含有 $J_z$, $J_+$，第三式中只含有 $J_z$, $J_-$，所以便于处理。若以 $j$ 为 $J_z$ 的本征值，則在表象空間里应当有滿足 $J_z\boldsymbol{u}_j=j\boldsymbol{u}_j$ 的矢量 $\boldsymbol{u}_j$ 存在。由(5.6)可得

$$J_zJ_+\boldsymbol{u}_j=J_+J_z\boldsymbol{u}_j+J_+\boldsymbol{u}_j=(j+1)J_+\boldsymbol{u}_j,$$
$$J_zJ_-\boldsymbol{u}_j=J_-J_z\boldsymbol{u}_j-J_-\boldsymbol{u}_j=(j-1)J_-\boldsymbol{u}_j.$$

因为 $J_z$ 是 Hermite 算符，它的本征值是实数，且令 $j$ 为其最大本征值，这样 $j+1$ 就不是本征值了，所以从第一式得 $J_+\boldsymbol{u}_j=0$。从第二式可知，如果 $J_-\boldsymbol{u}_j$ 不等于 0，$j-1$ 也是本征值。若把(5.6)的对易关系中第三式反复使用 $j-m$ 次，則可得

$$J_z J_-^{j-m} \boldsymbol{u}_j = m J_-^{j-m} \boldsymbol{u}_j. \tag{5.7}$$

把(5.6)的第二式反复使用 $p$ 次，再考虑到(5.7)就可以导出

$$J_+ J_-^p \boldsymbol{u}_j = p(2j+1-p) J_-^{p-1} \boldsymbol{u}_j. \tag{5.8}$$

因为表象空間的維数是有限的，把 $\boldsymbol{u}_j, J_-\boldsymbol{u}_j, J_-^2\boldsymbol{u}_j, \cdots$ 依次作出来，$J_-^{p+1}\boldsymbol{u}_j$ 能用 $\boldsymbol{u}_j$, $J_-\boldsymbol{u}_j$, $J_-^2\boldsymbol{u}_j$, $\cdots$, $J_-^p\boldsymbol{u}_j$ 的綫性組合表示的 $p$ 必存在。令最初出現的为 $p$，则有

$$J_-^{p+1}\boldsymbol{u}_j = a_0\boldsymbol{u}_j + a_1 J_-\boldsymbol{u}_j + \cdots + a_p J_-^p \boldsymbol{u}_j$$

成立。以 $J_+$ 乘上式的左方，由(5.8)得

$$(p+1)(2j-p) J_-^p \boldsymbol{u}_j = a_1(2j)\boldsymbol{u}_j + a_2 2(2j-1) J_-\boldsymbol{u}_j + \cdots$$
$$+ a_p p(2j+1-p) J_-^p \boldsymbol{u}_j.$$

因为 $\boldsymbol{u}_j$, $J_-\boldsymbol{u}_j$, $\cdots$, $J_-^p\boldsymbol{u}_j$ 是綫性独立的，所以 $p=2j$, $a_1=a_2=\cdots=a_p=0$。于是得

$$J_-^{2j+1}\boldsymbol{u}_j = a_0\boldsymbol{u}_j,$$

以 $J_z$ 乘它的左方，由(5.7)得

$$-(j+1)a_0\boldsymbol{u}_j = j a_0 \boldsymbol{u}_j,$$

因为 $2j+1$ 不能为 0，所以 $a_0=0$。由此可知，

$$J_-^{2j+1}\boldsymbol{u}_j = 0.$$

也就是說，$2j+1$ 个独立矢量 $\boldsymbol{u}_j$, $J_-\boldsymbol{u}_j$, $J_-^2\boldsymbol{u}_j$, $\cdots$, $J_-^{2j}\boldsymbol{u}_j$ 可用无穷小算符使之互相变换。这里不可約表象的阶数是 $2j+1$，由表象 $j$ 来决定，可用記号 $D_j$ 或 $D(j)$ 来表示。因为 $2j+1$ 必須是 0 或正整数，所以 $j$ 的值只能是整数或半奇数，即

$$j=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots.$$

考虑到以后的应用，需要給无穷小回轉 $J_+$, $J_-$, $J_z$ 以具体的形式，为此把基底矢量的归一化加以改变，且另行編号，即令

$$\psi_m = \frac{1}{(2j)!}\sqrt{\frac{(j+m)!}{(j-m)!}}\, J_-^{j-m}\boldsymbol{u}_j \quad (m=j, j-1, \cdots, -j). \tag{5.9}$$

在量子力学問題中，通常称 $m$ 为磁量子数。这时，首先由(5.7)得

到

$$J_z\psi_m=m\psi_m, \tag{5.10}$$

又由(5.8)，(5.9)得

$$J_\pm\psi_m=(J_x\pm iJ_y)\psi_m=\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,\psi_{m\pm 1}. \tag{5.11}$$

由这些关系可以决定无穷小回轉亦即角动量的矩陣。又因为

$$(J_x+iJ_y)(J_x-iJ_y)=J_x^2+J_y^2+J_z,$$

由(5.10)，(5.11)可得

$$\begin{aligned} J^2\psi_m &= (J_x^2+J_y^2+J_z^2)\psi_m \\ &= [(J_x+iJ_y)(J_x-iJ_y)+(J_z^2-J_z)]\psi_m \\ &= [(j+m)(j-m+1)+(m^2-m)]\psi_m \\ &= j(j+1)\psi_m. \end{aligned} \tag{5.12}$$

这样就求得了角动量模的平方的矩陣，它是仅由 $j$ 决定的单位矩陣的常数倍，而 $j$ 是决定表象阶数的数。这件事的量子力学的意义是 $\psi_m$ 表示角动量的大小 $j$，它的 $z$ 分量为 $m$ 状态。

最簡单而有意义的例是 $D_{\frac{1}{2}}$. 以 $\sigma_x$, $\sigma_y$, $\sigma_z$ 分别表示角动量三个分量的二倍，则根据(5.10)与(5.12)得

$$\sigma_x=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix},\quad \sigma_y=\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix},\quad \sigma_z=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}. \tag{5.13}$$

这叫 Pauli 自旋矩陣，在量子力学中經常用到它。它們之間的对易关系是

$$[\sigma_x,\sigma_y]=2i\sigma_z,\quad [\sigma_y,\sigma_z]=2i\sigma_x,\quad [\sigma_z,\sigma_x]=2i\sigma_y. \tag{5.14}$$

另外还满足：

$$\begin{gathered} \sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=E \quad (\text{单位矩陣}), \\ \sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x=\sigma_y\sigma_z+\sigma_z\sigma_y=\sigma_z\sigma_x+\sigma_x\sigma_z=0. \end{gathered} \tag{5.15}$$

所以具有如下的性质：

$$\begin{gathered} \sigma_x\sigma_y=-\sigma_y\sigma_x=i\sigma_z,\quad \sigma_y\sigma_z=-\sigma_z\sigma_y=i\sigma_x, \\ \sigma_z\sigma_x=-\sigma_x\sigma_z=i\sigma_y. \end{gathered} \tag{5.16}$$

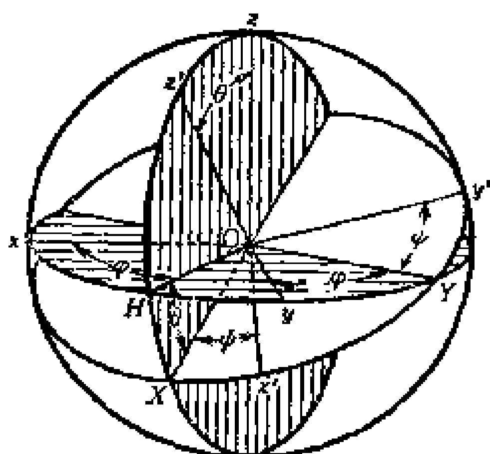



图 5.2 Euler 角

我們已經求得了无穷小回轉的任意阶数的表象，而有限回轉的表象(在原理上)是可以用积分无穷小回轉矩陣求得。但是除去少数特殊情形外，用这样方法直接求有限回轉的表象并不是一件簡单的事情。这里只把已得的結果写出来。如何表示有限回轉的問題，首先应提出的是普通采用 Euler 角的方法来表示的。现在考虑原点一致的两个坐标系 $Oxyz$，$Ox'y'z'$，假定 $Oxyz$ 是固定的，$Ox'y'z'$ 是运动的，而且最初两个坐标系一致，回轉的結果 $Ox'y'z'$ 成为图 5.2 所示的方位。首先用极角 $\theta$，$\varphi$ 来确定 $z'$ 軸的方向。因为 $x'y'$ 面垂直于 $z'$ 軸，如果在 $x'y'$ 面內把 $x'$ 軸方向指定，則同时 $y'$ 軸的方向也定了。为了决定 $x'$ 的方向，令包含 $z$，$z'$ 軸的平面与 $x'y'$ 面的交綫为 $OX$，而取 $x'$ 軸与 $OX$ 所成的角为 $\psi$. 在图 5.2 上，先繞 $z$ 軸轉一 $\varphi$ 角，再繞 $OY$ 轉一 $\theta$ 角，最后繞 $z'$ 軸轉一 $\psi$ 角，这三个回轉的联合就表示了 $Oxyz\to Ox'y'z'$ 的回轉。經过这三次回轉，坐标系的变动是

$$Oxyz \longrightarrow OHYz \longrightarrow OXYz' \longrightarrow Ox'y'z'.$$

由 Euler 角 $(\theta, \varphi, \psi)$ 决定的回轉群的 $2j+1$ 阶表象[1]是

$$L^j_{mm'}(\theta,\varphi,\psi)=e^{-im\varphi}e^{-im'\psi}P_{mm'}(z), \quad z=\cos\theta. \qquad (5.17)$$

[1] 关于有限回轉群的求法，可参看山内恭彥著：回轉群及其表象(回轉群とその表現)(岩波) p. 107.

这里

$$P_{mm'}(z)=(-1)^{m-m'}\left(\frac{1+z}{2}\right)^j\left(\frac{1-z}{1+z}\right)^{\frac{m-m'}{2}}$$

$$\cdot\sum_\nu\frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{\nu!(j-m-\nu)!(j+m'-\nu)!(m-m'+\nu)!}\left(\frac{z-1}{z+1}\right)^\nu$$

$$=\frac{(-1)^{m-m'}}{2^m}\sqrt{\frac{(j+m)!(j-m)!}{(j+m')!(j-m')!}}(1+z)^{\frac{m+m'}{2}}(1-z)^{\frac{m-m'}{2}}$$

$$\cdot P_{j-m}^{(m-m',m+m')}(z)\quad(m\geqslant m').\tag{5.18}$$

而

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(z)=\frac{(-1)^n}{2^n n!}\frac{1}{(1-z)^\alpha(1+z)^\beta}\frac{d^n}{dz^n}[(1-z)^{n+\alpha}(1+z)^{n+\beta}]\tag{5.19}$$

是 $z$ 的 $n$ 次多項式，称为 Jacobi 多項式。$m$ 与 $m'$ 有下面的置換关系：

$$D^j_{mm'}(\theta,\varphi,\psi)=(-1)^{m'-m}D^j_{m'm}(\theta,\varphi,\psi),\tag{5.20}$$

当 $m<m'$ 时，也可用(5.18)，(5.19)来决定。当 $j$ 为0或正整数 $l$ 而 $m'=0$ 时，是有限回轉表象的特殊情形，由 Jacobi 多項式的性质可得

$$D^l_{m0}(\theta,\varphi,\psi)=(-1)^m\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y_{l,-m}(\theta,\varphi).\tag{5.21}$$

$Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ 是以后时常出現的 $l$ 次球函数。

## §6 不可約表象的积的簡約

現在对两个不可約表象 $D_{j_1}$, $D_{j_2}$ 的积表象 $D_{j_1}\times D_{j_2}$ 的簡約作如下的考察。若令 $D_{j_1}$, $D_{j_2}$ 的表象空間的么正基底为 $\psi(j_1m_1)$ $(m_1=j_1,j_1-1,\cdots,-j_1)$ 与 $\psi(j_2m_2)$ $(m_2=j_2,j_2-1,\cdots,-j_2)$，則由它們所构成的积表象 $D_{j_1}\times D_{j_2}$ 的基底为 $\psi(j_1m_1)\psi(j_2m_2)$，而簡約 $\psi(j_1m_1)\psi(j_2m_2)$ 所得的不可約表象的么正基底为 $\psi(jm)$. 为了得到 $D_{j_1}\times D_{j_2}$ 的簡約，則需找出从 $\psi(j_1m_1)\psi(j_2m_2)$ 变到 $\psi(jm)$

的一次变换矩陣。这个矩陣的元素叫 Clebsch-Gordan 系数或 Wigner 系数，在习惯上用 $(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm)$ 来表示[1]。于是問題就成为求

$$\psi(jm)=\sum_{m_1,m_2}\psi(j_1m_1)\psi(j_2m_2)(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm) \qquad (6.1)$$

的系数了。首先把无旁小回轉 $J_z=J_{1z}+J_{2z}$ 作用在 (6.1) 上，由 (5.10) 可知，如果不是 $m_1+m_2=m$，則 $(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm)=0$。于是在 (6.1) 的关于 $m_1$，$m_2$ 的和式里只剩下满足 $m_1+m_2=m$ 的各項，当 $m$，$m_1$ 一定时，$m_2$ 也一定，实际上关于 $m_2$ 求和是多余的。但是为了保持 $m_1$，$m_2$ 的对称性，也可以保留对 $m_2$ 的求和而附加条件 $m_1+m_2=m$。

因为在 $D_{j_1}\times D_{j_2}$ 的表象空間里 $J_z$ 的最大本征值是 $m=j_1+j_2$，所以 $j$ 的最大值也是 $j_1+j_2$。这时 $m_1=j_1$，$m_2=j_2$，实际 (6.1) 的和只有一項，除去位相的任意性，系数就可以决定了。可以令

$$(j_1j_1j_2j_2|j_1j_2\ j_1+j_2\ \ j_1+j_2)=1. \qquad (6.2)$$

現在大的 $m$ 为 $j_1+j_2-1$，这时有 $m_1=j_1, m_2=j_2-1; m_1=j_1-1, m_2=j_2$ 两个基底。因为 $j$ 已經以 $j=j_1+j_2$ 出現，所以 $m=j_1+j_2-1$ 最初出現的是 $j=j_1+j_2-1$。当 $m=j_1+j_2-1$ 时，以 $J_-=J_{1-}+J_{2-}$ 作用于 $\psi(j_1+j_2,\ j_1+j_2)=\psi(j_1j_2)\psi(j_1j_2)$ 就可以求得系数的值。利用 (5.11) 可得

$$\psi(j_1+j_2,\ j_1+j_2-1)=\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\psi(j_1j_1-1)\psi(j_2j_2)+\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\psi(j_1j_1)\psi(j_2j_2-1). \qquad (6.3)$$

由于 $j=m=j_1+j_2-1$ 的本征函数是要选取与 (6.3) 正交的，故可令

---

[1] 此外还可以用 $(j_1j_2m_1m_2|j_1j_2jm)$，$(j_1m_1j_2m_2|jm)$，$C^{jm}_{j_1j_2;m_1m_2}$，$C(j_1j_2j|m_1m_2m)$，$S^{(j_1j_2)}_{jm_1m_2}$，$(-1)^{j-m}\sqrt{2j+1}V(j_1j_2j;\ m_1m_2-m)$，$(-1)^{j-m}\sqrt{2j+1}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}$ 等記号来表示。

$$\psi(j_1+j_2-1,\ j_1+j_2-1)$$
$$=-\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\psi(j_1 j_1-1)\psi(j_2 j_2)$$
$$+\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\psi(j_1 j_1)\psi(j_2 j_2-1). \qquad (6.4)$$

这里位相的选取完全是任意的。对于 $m=j_1+j_2-2$，有三个独立基底出现，分别为 $j=j_1+j_2$，$j=j_1+j_2-1$，与(6.3)同样，以 $j_-$ 作用于 (6.3)，(6.4) 就可以求得 $m=j_1+j_2-2$ 的两个独立的本征函数，可以选取属于 $j=j_1+j_2-2$ 的本征函数与这两个独立函数正交。以下每当 $m$ 减少 1 时，独立本征函数就增加一个，这时属于新出现的一个 $j(=m)$ 的本征函数，可以取定为与已出现的 $m<j\leqslant j_1+j_2$ 的所有本征函数正交的函数。依照这样的手續逐次求出遞減的 $j$ 的本征函数，从而可以求出这些函数的系数，而必有最小的 $j$ 存在。当 $m$ 减少 1 而独立的本征函数不增加时，$j$ 就是最小的了。根据积表象的阶数与簡約后的不可約表象的阶数的和必須相等的事实，也可以求得最小阶数 $j_m$，亦即从

$$(2j_1+1)(2j_2+1)=\sum_{j=j_m}^{j_1+j_2}(2j+1)$$
$$=(j_1+j_2)(j_1+j_2+2)-(j_m-1)(j_m+1)$$

可以求得 $j_m$。把上式化簡，立即可以得到 $j_m^2=(j_1-j_2)^2$ 或 $j_m=|j_1-j_2|$，所以积表象 $D_{j_1}\times D_{j_2}$ 可以簡約为不可約表象的和，即

$$D_{j_1}\times D_{j_2}=D_{j_1+j_2}+D_{j_1+j_2-1}+\cdots+D_{|j_1-j_2|}. \qquad (6.5)$$

也就是只有满足 $|j_1-j_2|\leqslant j\leqslant j_1+j_2$ 的关系的 $j$ 才能出現，这样的条件叫三角条件。

上面 (6.2)，(6.3)，(6.4) 以及以下的本征函数的求法，从初等立場来看是很容易理解的，但是，如果 $j_1$，$j_2$ 中有一个不是很小时就很繁杂了。还有一个缺点是位相的任意性，在統一位相的条件下来处理一个問題时，就感覺不方便。标准的 Clebsch-Gordan

系数不在这里推导了,通常采用下面的形式❶:

$$
\begin{aligned}
&(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm)\\
&=\delta(m_1+m_2,m)[(2j+1)(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j+j_2-j_1)!]^{\frac{1}{2}}\\
&\quad\cdot[(j_1+j_2+j+1)!]^{-\frac{1}{2}}\sum_{\nu}(-1)^{\nu}[(j_1+m_1)!\ (j_1-m_1)!\\
&\quad\cdot(j_2+m_2)!\,(j_2-m_2)!\,(j+m)!\,(j-m)!]^{\frac{1}{2}}\\
&\quad\cdot[\nu!(j_1+j_2-j-\nu)!\cdot(j_1-m_1-\nu)!\,(j-j_2+m_1+\nu)!\\
&\quad\cdot(j-j_1-m_2+\nu)!]^{-1}.
\end{aligned}
\tag{6.6}
$$

在这样形式下矩陣的元素全是实数,(6.1)的变换是正交变换。从而满足下面的正交关系:

$$
\sum_{m_1,m_2}(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm)\,(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j'm')
=\delta(j,\ j')\delta(m,\ m'),
\tag{6.7}
$$

$$
\sum(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm)\,(j_1m_1'j_2m_2'|j_1j_2jm)
=\delta(m_1,\ m_1')\delta(m_2,\ m_2').
\tag{6.8}
$$

把(6.1)用正交关系(6.8)来解,可得

$$
\psi(j_1m_1)\psi(j_2m_2)=\sum_{j=j_1+j_2}^{|j_1-j_2|}(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm)\psi(jm).
\tag{6.9}
$$

Clebsch-Gordan 系数 $(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j_3m_3)$ 与置换其中的 $j_1,\ j_2,\ j_3$ 以及改变 $m_1,\ m_2,\ m_3$ 記号所得的結果有下面的关系,这称为 Clebsch-Gordan 系数的对称性。把(6.6)的和式中的变数用其他变数来代替,就很容易推导出下面的关系:

$$
\begin{aligned}
(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j_3m_3)&=(-1)^{j_1+j_2-j_3}(j_2m_2j_1m_1|j_2j_1j_3m_3)\\
&=(-1)^{j_1+j_2-j_3}(j_1-m_1j_2-m_2|j_1j_2j_3-m_3)\\
&=(j_2-m_2j_1-m_1|j_1j_2j_3-m_3)\\
&=(-1)^{j_1-m_1}\sqrt{\frac{2j_3+1}{2j_2+1}}(j_1m_1j_3-m_3|j_1j_3j_2-m_2)\\
&=(-1)^{j_2+m_2}\sqrt{\frac{2j_3+1}{2j_1+1}}(j_3-m_3j_2m_2|j_3j_2j_1-m_1).
\end{aligned}
\tag{6.10}
$$

❶ 关于(6.6)的推导方法,参看山内恭彦著:回轉群及其表象(回轉群とその表現)p. 113, p. 138.

关于 Clebsch-Gordan 系数有下面两个递推式成立：

$$(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm-1)$$
$$=\frac{1}{\sqrt{(j+m)(j-m+1)}}$$
$$\cdot\{\sqrt{(j_1+m_1+1)(j_1-m_1)}(j_1m_1+1j_2m_2|j_1j_2jm)$$
$$+\sqrt{(j_2+m_2+1)(j_2-m_2)}(j_1m_1j_2m_2+1|j_1j_2jm)\},\quad(6.11)$$

$$(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j+1\ m)=\frac{1}{\sqrt{(j+1-m)(j+1+m)}}$$
$$\cdot\sqrt{\frac{(2j+2)^3(2j+1)(2j+3)}{(j_1+j_2-j)(j+j_1-j_2+1)(j+j_2-j_1+1)(j_1+j_2+j+2)}}$$
$$\cdot\left\{\left[m_1-m_2\frac{j_1(j_1+1)-j_2(j_2+1)+j(j+1)}{2j(j+1)}\right]\right.$$
$$\cdot(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm)-\sqrt{(j-m)(j+m)}$$
$$\cdot\sqrt{\frac{(j_1+j_2-j+1)(j+j_1-j_2)(j+j_2-j_1)(j_1+j_2+j+1)}{(2j)^2(2j-1)(2j+1)}}$$
$$\left.\cdot(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j-1m)\right\}.\quad(6.12)$$

把(6.6)代入这两个递推式里，就可以直接驗証它是成立的，而把 $J_-=J_{1-}+J_{2-}$ 作用于 (6.1) 就可以特别簡单地得到 (6.11) (实际上(6.3)就是从这样作用得来的)。至于(6.12)，如果知道了下节的張量計算法就很容易得出。这两个递推式視为 Clebsch-Gordan 系数的基本关系式，从这里还能导出(6.6)的 Clebsch-Gordan 系数表达式，实际上 Racah 所用的就是这种方法(G. Racah: Phys. Rev., 62(1942), 438)。

現在叙述一下在应用方面时常出現的 Clebsch-Gordan 系数的特殊情形。先考察在(6.6)当 $m_1=m_2=m=0$ 的情形，由(6.10)的第二关系式知道，如果 $j_1+j_2-j$ 为奇数，則其値为 0。如果 $j_1+j_2-j$ 为偶数，則实际計算 (6.6) 的和得下面的結果 (上述 Racah 論文的附录 A)：

$$(j_1 0 j_2 0 | j_1 j_2 j 0)$$

$$=(-1)^{j+g}\sqrt{(2j+1)\frac{(j_1+j_2-j)!(j_1+j-j_2)!(j_2+j-j_1)!}{(j_1+j_2+j+1)!}}$$

$$\cdot\frac{g!}{(g-j_1)!(g-j_2)!(g-j)!}, \tag{6.13}$$

但这里 $j_1+j_2+j=2g=$偶数。这从定义看来是当然的結果。如果 $j_2=m_2=0$，則

$$(j_1 m_1 0\ 0 | j_1 0\, j m)=\delta(j_1 j_2)\delta(m_1 m_2). \tag{6.14}$$

## §7 两个以上不可約表象的积的簡約

在上节說明了两个不可約表象的积 $D_{j_1}\times D_{j_2}$ 在簡約后滿足 $|j_1-j_2|\leqslant j\leqslant j_1+j_2$ 的不可約表象 $D_j$ 各有一次出現，而从基底 $\psi(j_1m_1)\psi(j_2m_2)$ 变換到簡約后的基底 $\psi(jm)$ 的变換系数是 Clebsch-Gordan 系数。在这一节我們要考察三个、四个不可約表象的积的簡約。

簡約三个不可約表象积 $D_{j_1}\times D_{j_2}\times D_{j_3}$，可以把两个不可約表象积的簡約施行二回。但是在一般情况下，在簡約的結果里出現的不可約表象 $D_J$ 并不限于每次一回，这时独立基底 $\psi(JM)$ 的数目与不可約表象的回数相同。具体地說，为了决定这个基底，先指定积的順序，并且需要知道在中間出現的不可約表象。例如依照

$$D_{j_1}\times D_{j_2}=\sum D_{J_{12}}\quad (|j_1-j_2|\leqslant J_{12}\leqslant j_1+j_2),$$

先簡約最初两个表象积，并作出基底 $\psi(j_1j_2J_{12}M_{12})$，然后再依照

$$D_{J_{12}}\times D_{j_3}=\sum D_J\quad (|J_{12}-j_3|\leqslant J\leqslant J_{12}+j_3)$$

簡約三个表象的积，而作出基底

$$\psi(j_1j_2(J_{12})j_3JM), \tag{7.1}$$

則对应着每个 $J_{12}$ 能决定相应的基底。如果把积的順序变換，而对

$$D_{j_1}\times(D_{j_2}\times D_{j_3})=D_{j_1}\times\sum D_{J_{23}}=\sum D_J$$

$$(|j_2-j_3|\leqslant J_{23}\leqslant j_2+j_3,\ |J_{23}-j_1|\leqslant J\leqslant J_{23}+j_1)$$

施行簡約，則可作出与(7.1)不同的基底組

$$\psi(j_1 j_2 j_3 (J_{23}) JM). \tag{7.2}$$

这样，对于每个 $JM$，由(7.1)与(7.2)可得同数的基底組。現在考察这两組基底 $\psi(j_1 j_2 (J_{12}) j_3 JM)$ 与 $\psi(j_1 j_2 j_3 (J_{23}) JM)$ 之間的变换，并以

$$\begin{aligned}&\langle j_1 j_2 (J_{12}) j_3 J \mid j_1 j_2 j_3 (J_{23}) J\rangle \\ &\quad = \sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{23}+1)}\, W(j_1 j_2 J j_3;\, J_{12} J_{13})\end{aligned} \tag{7.3}$$

表示变换的矩陣元素。很明显，这个变换对于不同的 $J$，矩陣元素为0。可以証明(7.3)与 $M$ 无关[1]，所以沒有写出 $M$。(7.3)的右边的 $W(j_1 j_2 J j_3;\, J_{12} J_{13})$ 叫做 Racah 系数。

把基底(7.1)，(7.2)用 Clebsch-Gordan 系数再具体一点写出，就成为

$$\begin{aligned}\psi(j_1 j_2 (J_{12}) j_3 JM) = \sum & (j_1 m_1 j_2 m_2 \mid j_1 j_2 J_{12} M_{12}) \\ & \cdot (J_{12} M_{12} j_3 m_3 \mid J_{12} j_3 JM) \\ & \cdot \psi(j_1 m_1)\psi(j_2 m_2)\psi(j_3 m_3),\end{aligned} \tag{7.4}$$

$$\begin{aligned}\psi(j_1 j_2 j_3 (J_{23}) JM) = \sum & (j_2 m_2 j_3 m_3 \mid j_2 j_3 J_{23} M_{23}) \\ & \cdot (j_1 m_1 J_{23} M_{23} \mid j_1 J_{23} JM) \\ & \cdot \psi(j_1 m_1)\psi(j_2 m_2)\psi(j_3 m_3).\end{aligned} \tag{7.5}$$

其中每一个 $\sum$ 都表示关于 $m_1$，$m_2$，$m_3$ 求和。从而三个不可約表象的两种合成方法間的变换(7.3)可以写为

$$\begin{aligned}&\langle j_1 j_2 (J_{12}) j_3 J \mid j_1 j_2 j_3 (J_{23}) J\rangle \\ &\quad = \sum_{m_1, m_2, m_3} (j_1 m_1 j_2 m_2 \mid j_1 j_2 J_{12} M_{12}) \cdot (J_{12} M_{12} j_3 m_3 \mid J_{12} j_3 JM) \\ &\qquad \cdot (j_2 m_2 j_3 m_3 \mid j_2 j_3 J_{23} M_{23})(j_1 m_1 J_{23} M_{23} \mid j_1 J_{23} JM),\end{aligned} \tag{7.6}$$

也就是可以用四个 Clebsch-Gordan 系数的乘积的和来表示。在(7.6)中有关于 $m_1$，$m_2$，$m_3$ 的和及各个 Clebsch-Gordan 系数在

[1] 参看山内恭彦著：回轉群及其表象(回轉群とその表現)，§13.

(6.6)中的和，可以把其中一个除外而进行求和[1]，結果 Racah 系数就成为

$$\left.\begin{aligned} &W(abcd;ef)=\Delta(abe)\Delta(cde)\Delta(acf)\Delta(bdf)w(abcd;ef),\\ &\text{这里}\quad \Delta(abc)=\sqrt{\frac{(a+b-c)!(a-b+c)!(b-a+c)!}{(a+b+c+1)!}},\\ &\qquad w(abcd;ef)=\sum_z(-1)^z(a+b+c+d+1-z)!\\ &\qquad\qquad \div[(a+b-e-z)!(c+d-e-z)!\\ &\qquad\qquad \cdot(a+c-f-z)!(b+d-f-z)!\\ &\qquad\qquad \cdot z!(a+d-e-f+z)!(b+c-e-f+z)!]. \end{aligned}\right\}(7.7)[2]$$

关于 $z$ 的求和是在阶乘的每个因数都不为負整数的范圍内进行的。由定义(7.3)可知，Racah 系数 $W(abcd;ef)$ 必須満足下面四个三角条件： $(abe)$，$(cde)$，$(acf)$，$(bdf)$.
也就是說不满足 $|a-b|\leqslant e\leqslant a+b$ 一类条件的都是 0。(7.7)含有 $\Delta(abc)$ 等因数，也反映了这件事实。

由 (7.7) 中求和变数 $z$ 的各种变化，可以求得 Racah 系数关于变数置换的对称关系。一般情形有 24 个，其中最基本的关系是

$$\begin{aligned} W(abcd;ef)&=W(badc;ef)=W(cdab;ef)\\ &=W(acbd;fe)=(-1)^{e+f-a-d}W(ebcf;ad)\\ &=(-1)^{e+f-b-c}W(aefd;bc), \end{aligned}\tag{7.8}$$

把这些組合起来，可以得到其他关系式。

由于两組基底間的变换(7.3)是正交的，所以有

$$\begin{aligned} &\sum_{J_{12}}\langle j_1j_2(J_{12})j_3J|j_1j_2j_3(J_{23})J\rangle\langle j_1j_2(J_{12})j_3J|j_1j_2j_3(J'_{23})J\rangle\\ &\quad=\delta(J_{23},J'_{23}),\\ &\sum_{J_{23}}\langle j_1j_2(J_{12})j_3J|j_1j_2j_3(J_{23})J\rangle\langle j_1j_2(J'_{12})j_3J|j_1j_2j_3(J_{23})J\rangle\\ &\quad=\delta(J_{12},J'_{12}) \end{aligned}\tag{7.9}$$

---

[1] G. Racah: Phys. Rev., 62(1942), 438, Appendix B.

[2] 和 Wigner 的 $6j$ 記号的关系是 $\begin{Bmatrix}abe\\dcf\end{Bmatrix}=(-)^{a+b+c+d}W(abcd;ef)$.

成立，用 Racah 系数写出可得

$$\left.\begin{aligned}\sum_e (2e+1)W(abcd;ef)W(abcd;ef') &= \delta(f,f')/(2f+1),\\ \sum_f (2f+1)W(abcd;ef)W(abcd;e'f) &= \delta(e,e')/(2e+1).\end{aligned}\right\}\quad(7.10)$$

利用对称关系 (7.8) 可以得到許多同样的关系式。关于作出三个不可約表象的积 $D_{j_1}\times D_{j_2}\times D_{j_3}$，我們已考虑了 $\{D_{j_1}\times D_{j_2}\}\times D_{j_3}$ 与 $D_{j_1}\times(D_{j_2}\times D_{j_3})$ 两种情形，但是 $\{D_{j_1}\times D_{j_3}\}\times D_{j_2}$ 的作法当然也是可能的，它的基底可以取为

$$\psi(j_1 j_3(J_{13})j_2 JM). \qquad (7.11)$$

也要考虑

$$\psi(j_1 j_2(J_{12})j_3 JM)\Leftrightarrow\psi(j_1 j_3(J_{13})j_2 JM),$$

$$\psi(j_1 j_2 j_3(J_{23})JM)\Leftrightarrow\psi(j_1 j_3(J_{13})j_2 JM),$$

如果考虑到 Clebsch–Gordan 系数的对称性(6.10)及 Racah 系数的对称性(7.8)，利用 Racah 系数上面的关系式就有

$$\left.\begin{aligned}&\langle j_1 j_2(J_{12})j_3 J\,|\,j_1 j_3(J_{13})j_2 J\rangle\\ &\quad=\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{13}+1)}\,W(j_2 J_{12} J_{13} j_3;j_1 J),\\ &\langle j_1 j_2 j_3(J_{23})J\,|\,j_1 j_3(J_{13})j_2 J\rangle\\ &\quad=(-1)^{j_1+j_3-J_{13}}\sqrt{(2J_{13}+1)(2J_{23}+1)}\,W(j_1 j_3 J\,j_2;\\ &\qquad J_{13}J_{23}).\end{aligned}\right\}\quad(7.12)$$

若用这些变换表示(7.3)的变换，则为

$$\sum_{J_{13}}\langle j_1 j_2(J_{12})j_3 J\,|\,j_1 j_3(J_{13})j_2 J\rangle\langle j_1 j_3(J_{13})j_2 J\,|\,j_1 j_2 j_3(J_{23})J\rangle$$

$$=\langle j_1 j_2(J_{12})j_3 J\,|\,j_1 j_2 j_3(J_{23})J\rangle,$$

或根据(7.2)，(7.3)用 Racah 系数表示就成为

$$\sum_e(-1)^{a+b-e}(2e+1)W(abcd;ef)W(bacd;ef')$$

$$=W(aff'b;cd). \qquad (7.13)$$

这里也用了(7.8)的关系。除(7.13)以外含有 Racah 系数的恒等式还有

$$\sum_{\lambda}(2\lambda+1)W(a'\lambda be;\ ae')W(a'\lambda fc;\ ac')W(c\lambda de';\ c'e)$$

$$=W(abcd;\ ef)W(a'bc'd;\ e'f) \tag{7.14}$$

成立❶。在 Racah 系数的变数中如果有一个是 0 就簡单了。由(7.8)的关系，可以設想其中某一个是 0，例如令(7.3)中的 $j_3=0$，则 $J_{12}=J$，$J_{23}=j_2$，这样左边就变为 1，由此可知

$$W(j_1j_2J0;\ J_{12}J_{13})$$
$$=\delta(J_{12},J)\delta(J_{13},j_2)/\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{13}+1)}. \tag{7.15}$$

如果分号以后的变数为 0，例如 $J_{12}=0$，则为

$$W(j_1j_2Jj_3;\ 0\ J_{13})$$
$$=(-1)^{J_{13}-j_1-j_3}\delta(j_1,j_2)\delta(J,j_3)/\sqrt{(2j_1+1)(2j_3+1)}. \tag{7.16}$$

如果变数里有一个 $\frac{1}{2}$，Racah 系数也可以用比較簡单的式子表示。令恒等式(7.14)中的 $e'=\frac{1}{2}$ 可得

$$2e\sqrt{(a+c+f+1)(a+c-f)}\,W\left(a-\frac{1}{2}\,bc-\frac{1}{2}\,d;\,e-\frac{1}{2}\,f\right)$$
$$=\sqrt{(a+b+e+1)(a-b+e)(c+d+e+1)(c-d+e)}\,W(abcd;\ ef)$$
$$-\sqrt{(a+b-e+1)(b-a+e)(c+d-e+1)(d-c+e)}$$
$$\cdot W(abcd;\ e-1f). \tag{7.17}$$

把(7.17)当作遞推式使用很便利，利用它来計算 Racah 系数的值，也比利用(7.7)来得簡单。假若 $a, b, c, d, e, f$ 全是整数，以 $a-\frac{1}{2}$，$c-\frac{1}{2}$，$e-\frac{1}{2}$ 三个半奇数与 $b, d, f$ 三个整数为变数的 Racah 系数，根据(7.17)可以由变数全为整数的 Racah 系数計算

---

❶ 把(7.3)代入

$$\langle j_1j_2(J_{12})j_3j_4(J_{34})J\,|\,[j_1,\ j_2j_3(J_{23})](J_{123})j_4J\rangle$$
$$=\langle J_{12},\ j_3j_4(J_{34})J\,|\,J_{12}j_3(J_{123})j_4J\rangle\langle j_1j_2(J_{12})j_3J_{123}\,|\,j_1,\ j_2j_3(J_{23})J_{123}\rangle$$
$$=\sum_{\lambda}\langle j_1j_2(J_{12})J_{34}J\,|\,j_1,\ j_2J_{34}(\lambda)J\rangle\langle j_2,\ j_3j_4(J_{34})\lambda\,|\,j_2j_3(J_{23})j_4\lambda\rangle$$
$$\cdot\langle j_1,\ J_{23}j_4(\lambda)J\,|\,j_1J_{23}(J_{123})j_4J\rangle$$

里，再利用(7.8)就可以得到。

出来。如果 $b, d, e$ 是半奇数，$a, c, f$ 是整数，则由以三个半奇数与三个整数为变数的 Racah 系数可以推知含有四个半奇数与二个整数为变数的 Racah 系数。

由定义 Racah 系数的(7.3)与(7.6)可得常用的关系式。利用 Clebsch-Gordan 的正交关系可得

$$\sum_{\beta}(a\alpha b\beta|abe\varepsilon)(e\varepsilon d\delta|edc\gamma)(b\beta d\delta|bdf\varphi)$$
$$=\sqrt{(2e+1)(2f+1)}\,W(abcd;ef)(a\alpha f\varphi|afc\gamma), \qquad (7.18)$$

对(7.18)再利用(6.8)的正交关系可得

$$\sum_{f}\sqrt{(2e+1)(2f+1)}\,W(abcd;ef)(a\alpha f\varphi|afc\gamma)(b\beta d\delta|bdf\varphi)$$
$$=(a\alpha b\beta|abe\varepsilon)(e\varepsilon d\delta|edc\gamma). \qquad (7.19)$$

同样又可得

$$\sum_{e}\sqrt{(2e+1)(2f+1)}\,W(abcd;ef)(a\alpha b\beta|abe\varepsilon)(e\varepsilon d\delta|edc\gamma)$$
$$=(a\alpha f\varphi|afc\gamma)(b\beta d\delta|bdf\varphi). \qquad (7.20)$$

以下我們所考察的四个不可約表象的积的簡約与三个不可約表象的积的簡約完全一样，先指定构成积的順序，如果不知道中间出現的不可約表象就不能决定基底。在作 $D_{j_1}\times D_{j_2}\times D_{j_3}\times D_{j_4}$ 的积时先把

$$\{D_{j_1}\times D_{j_2}\}\times\{D_{j_3}\times D_{j_4}\}$$

与

$$\{D_{j_1}\times D_{j_3}\}\times\{D_{j_2}\times D_{j_4}\}$$

基底間的变换系数写为

$$\langle j_1j_2(J_{12})j_3j_4(J_{34})J|j_1j_3(J_{13})j_2j_4(J_{24})J\rangle$$
$$=\sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)(2J_{13}+1)(2J_{24}+1)}\,U\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12}\\ j_3 & j_4 & J_{34}\\ J_{13} & J_{24} & J\end{bmatrix}, \qquad (7.21)$$

然后再定义 $U$ 系数。这和(7.6)一样，可以用六个 Clebsch-Gordan

系数的乘积的和来表示，这里省略了。(7.21) 的变换系数可用三个不可約表象的积的簡約方式間的变换(7.3)的积的和来表示，即

$$\langle j_1j_2(J_{12})j_3j_4(J_{34})J\,|\,j_1j_3(J_{13})j_2j_4(J_{24})J\rangle$$
$$=\sum_{\lambda}(2\lambda+1)\langle J_{12}j_3j_4(J_{34})J\,|\,J_{12}j_3(\lambda)j_4J\rangle$$
$$\cdot\langle j_1j_2(J_{12})j_3\lambda\,|\,j_1j_3(J_{13})j_2\lambda\rangle$$
$$\cdot\langle J_{13}j_2(\lambda)j_4J\,|\,J_{13}j_2j_4(J_{24})J\rangle.$$

以(7.21)，(7.3)代入上式，利用 Racah 系数的对称性(7.8)，就可以把 $U$ 系数用三个 $W$ 系数的积的和来表示，即

$$U\begin{bmatrix} a & b & e \\ c & d & e' \\ f & f' & g \end{bmatrix}=(-1)^{\sigma}\sum_{\lambda}(2\lambda+1)W(becf;a\lambda)$$
$$\cdot W(ce'bf';d\lambda)W(ee'ff';g\lambda). \qquad (7.22)$$

这里 $\sigma=a+b+c+d+e+e'+f+f'$，且恒为整数。在这里如果不滿足三角条件

$$(abe),\ (cde'),\ (ff'g),$$
$$(acf),\ (bdf'),\ (ee'g),$$

$U$ 就等于 0。利用 $W$ 系数的对称性，很容易导出 $U$ 系数的对称性，一般有 72 个关系式，基本的有两个是行与列的置换：

$$U\begin{bmatrix} a & b & e \\ c & d & e' \\ f & f' & g \end{bmatrix}=U\begin{bmatrix} a & c & f \\ b & d & f' \\ e & e' & g \end{bmatrix} \qquad (7.23)$$

及行的置换：

$$U\begin{bmatrix} a & b & e \\ c & d & e' \\ f & f' & g \end{bmatrix}=(-1)^{\sigma}U\begin{bmatrix} c & d & e' \\ a & b & e \\ f & f' & g \end{bmatrix}=(-1)^{\sigma}U\begin{bmatrix} f & f' & g \\ c & d & e' \\ a & b & e \end{bmatrix}, \qquad (7.24)$$

由(7.24)的第一关系知道，如果 $a=c$，$b=d$，$e=e'$，則

$$U\begin{bmatrix} a & b & e \\ a & b & e \\ f & f' & g \end{bmatrix}=0 \quad (f+f'+g=\text{奇数时}). \tag{7.25}$$

因为(7.21)的变换关系是正交的，所以关于$U$系数的正交关系也成立，即

$$\sum_{f,f'}(2f+1)(2f'+1)U\begin{bmatrix} a & b & e \\ c & d & e' \\ f & f' & g \end{bmatrix}U\begin{bmatrix} a & b & e_1 \\ c & d & e'_1 \\ f & f' & g \end{bmatrix}$$

$$=\delta(e, e_1)\delta(e', e'_1)/(2e+1)(2e'+1), \tag{7.26}$$

$$\sum_{e,e'}(2e+1)(2e'+1)U\begin{bmatrix} a & b & e \\ c & d & e' \\ f & f' & g \end{bmatrix}U\begin{bmatrix} a & b & e \\ c & d & e' \\ f_1 & f'_1 & g \end{bmatrix}$$

$$=\delta(f, f_1)\delta(f', f'_1)/(2f+1)(2f'+1). \tag{7.27}$$

和 Racah 系数間的恒等式(7.13)相对应的$U$系数間的恒等式有

$$\sum_{f,f'}(-1)^{e'-f'-h'+2e}(2f+1)(2f'+1)U\begin{bmatrix} a & b & e \\ c & d & e' \\ f & f' & g \end{bmatrix}U\begin{bmatrix} a & c & f \\ d & b & f' \\ h & h' & g \end{bmatrix}$$

$$=U\begin{bmatrix} a & b & e \\ d & c & e' \\ h & h' & g \end{bmatrix} \tag{7.28}$$

等关系式成立，这里不一一列举❶。

$U$系数的变数中，如果有一个是0就簡单了，而归結于 Racah 系数。由(7.22)，(7.16)得

$$U\begin{bmatrix} a & b & e \\ c & d & e \\ f & f & 0 \end{bmatrix}=(-1)^{e+f-a-d}W(abcd;ef)/\sqrt{(2e+1)(2f+1)}. \tag{7.29}$$

❶ 参看 A. Arima, H. Horie and Y. Tanabe: Prog. Theor. Phys., 11(1954), 405.

## §8 球 函 数

在 §4 里我們指出了可以用角动量的 $x, y, z$ 分量 $L_x, L_y, L_z$ 来定义空間回轉的无穷小算符。$L_x, L_y, L_z$ 在极坐标系 $r, \theta, \varphi$ 中則为

$$\left.\begin{aligned} L_z &= -i\frac{\partial}{\partial\varphi}, \\ L_x \pm iL_y &= e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \end{aligned}\right\} \tag{8.1}$$

順便在此把 $L^2$ 的值求出来：

$$\begin{aligned} L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 &= (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) + L_z^2 - L_z \\ &= -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \end{aligned} \tag{8.2}$$

因为在旋轉时 $r$ 不变，所以取 $r=1$，即考慮单位球面上的变换就可以了。因为不可約表象的基底可以依照对应于角动量算符 $L_z$ 的本征值 $m$ 的本征矢量来取(§5)，現在以 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 表示在极坐标里的不可約基底，这里 $l$ 表示在不可約表象中的 $L_z$ 的最大本征值。这时 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 必滿足(8.1)的第一式，

$$-i\frac{\partial Y_{lm}}{\partial\varphi} = mY_{lm}, \tag{8.3}$$

于是 $Y_{lm}$ 应当具有下面的形式：

$$Y_{lm} = \Theta_{lm}e^{im\varphi}, \tag{8.4}$$

这里 $\Theta$ 只是 $\theta$ 的函数。为了使 $Y_{lm}$ 是 $\varphi$ 的单值函数，$m$ 必須是 0 或整数。这时 (5.6) 的对易关系也成立，采用与 §5 相同的証法可得

$$(L_x + iL_y)\Theta_{ll}e^{il\varphi} = 0.$$

利用(8.1)第二式的具体形式可得方程

$$\frac{d\Theta_{ll}}{d\theta} - l\cot\theta\cdot\Theta_{ll} = 0.$$

以 $K$ 为积分常数，则它的解为

$$\Theta_{ll}=K\sin^l\theta, \tag{8.5}$$

因此 $Y_{ll}=K\sin^l\theta e^{il\varphi}$。和以前讲的一样，以算符 $L_-=L_x-iL_y$ 作用于这个函数，就可得出对应于 $m=l-1, l-2, \cdots$ 的基底。由(8.1)的第二式知关于算符 $L_\pm=L_x\pm iL_y$，对于 $\theta$ 的任意函数 $f(\theta)$，有

$$L_\pm f(\theta)e^{im\varphi}=\mp e^{i(m\pm1)\varphi}\sin^{1\pm m}\theta\frac{d}{d\cos\theta}[\sin^{\mp m}\theta\cdot f(\theta)],$$

$$L_\pm^k f(\theta)e^{im\varphi}=(\mp1)^k e^{i(m\pm k)\varphi}\sin^{k\pm m}\theta\frac{d^k}{(d\cos\theta)^k}[\sin^{\mp m}\theta\cdot f(\theta)]. \tag{8.6}$$

将 $L_-^k$ 的关系应用于 $f(\theta)=\sin^l\theta$，$k=l-m$，$m=l$，再参照(5.9)可得

$$Y_{lm}=K\sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}e^{im\varphi}\frac{1}{\sin^m\theta}\frac{d^{l-m}}{(d\cos\theta)^{l-m}}[\sin^{2l}\theta]; \tag{8.7}$$

当 $m=0$ 时，则为

$$Y_{l0}=(-1)^lK\frac{d^l}{(d\cos\theta)^l}(\cos^2\theta-1)^l=(-1)^lK\cdot2^l\cdot l!P_l(\cos\theta),$$

这里 $P_l(x)$ 是 $l$ 阶 Legendre 多项式：

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}[(x^2-1)^l].$$

若令 $K=(-1)^l\frac{1}{2^l l!}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$，则

$$Y_{l0}=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta). \tag{8.8}$$

为了在量子力学上应用方便，取归一化因子 $\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$。至于用 $P_l(\cos\theta)$ 表示 $Y_{lm}$，当 $m\leqslant0$ 时利用(8.7)，当 $m\geqslant0$ 时则从 $Y_{l0}$ 出发顺次以 $L_+$ 作用于 $Y_{lm}$，这时可以应用(8.6)的 $L_+$。这样，$m\geqslant0$

时球函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 为

$$\left.\begin{aligned} Y_{lm} &= (-1)^m e^{im\varphi}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\sin^m\theta \\ &\quad\cdot\frac{d^m}{(d\cos\theta)^m}[P_l(\cos\theta)], \\ Y_{l-m} &= e^{-im\varphi}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\sin^m\theta \\ &\quad\cdot\frac{d^m}{(d\cos\theta)^m}[P_l(\cos\theta)]. \end{aligned}\right\} \tag{8.9}$$

依 $Y_{lm}$ 的定义，不論 $m$ 是正是負，关系式

$$\overline{Y}_{lm} = (-1)^m Y_{l-m} \tag{8.10}$$

都成立。如果采用这样选取基底的方法，即以 $l$ 代(5.10)，(5.11)中的 $j$，以 $Y_{lm}$ 代其中的 $\psi_{jm}$，即得 $L_z$，$L_x \pm iL_y$ 的变换矩陣。于是(8.3)的 $L^2$ 的矩陣就成为

$$L^2 Y_{lm} = (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2) Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm}. \tag{8.11}$$

从 $Y_{lm}$ $(m=l, l-1, \cdots, -l)$ 可作出$(2l+1)$阶不可約表象 $D_l$ 的基底。

現在来求积表象 $D_{l_1}\times D_{l_2}$ 的基底 $Y_{l_1m_1}$，$Y_{l_2m_2}$ 与簡約后的表象 $D_l(|l_1-l_2|\leqslant l\leqslant l_1+l_2)$ 的基底 $Y_{lm}$ 之間的关系。这个变换原来不是么正变换，以 $C(l_1l_2l)$ 为待定常数，参照(6.1)令

$$C(l_1l_2l)Y_{lm} = \sum_{m_1, m_2}(l_1m_1l_2m_2|l_1l_2lm)Y_{l_1m_1}Y_{l_2m_2}.$$

因为 $C(l_1l_2l)$ 与 $m_1$，$m_2$，$m$ 无关，所以令 $m=0$ 及 $\theta=0$ 可知

$$Y_{l0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}, \quad Y_{lm} = 0 \quad (m\neq 0).$$

右边的和只剩下 $m_1=m_2=0$ 的項，而成为

$$C(l_1l_2l)\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} = (l_10\,l_20|l_1l_2l0)\sqrt{\frac{2l_1+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{2l_2+1}{4\pi}},$$

这样就决定了 $C(l_1l_2l)$，即

$$\sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}}(l_1 0 l_2 0|l_1 l_2 l 0)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$
$$=\sum_{m_1,m_2}(l_1 m_1 l_2 m_2|l_1 l_2 l m)Y_{l_1 m_1}(\theta,\varphi)Y_{l_2 m_2}(\theta,\varphi),\qquad(8.12)$$

或利用 Clebsch–Gordan 系数的正交关系(6.8)可得

$$Y_{l_1 m_1}(\theta,\varphi)Y_{l_2 m_2}(\theta,\varphi)$$
$$=\sum_l\sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}}(l_1 0 l_2 0|l_1 l_2 l 0)\cdot(l_1 m_1 l_2 m_2|l_1 l_2 l m)Y_{lm}(\theta,\varphi)\qquad(8.13)$$

的关系。$(l_1 0 l_2 0|l_1 l_2 l 0)$ 可由(6.13)求得，因为 $l_1+l_2+l$ 非偶数时其值为0，所以 $l$ 除去满足三角条件以外，只在 $l_1+l_2+l=$ 偶数时才出现。作为(8.13)的简单应用，例如計算出以 $\cos\theta$, $\sin\theta e^{\pm i\varphi}$ 乘 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 的結果。由于

$$\cos\theta=\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10}(\theta,\varphi),\quad \sin\theta e^{\pm i\varphi}=\mp\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1\pm1}(\theta,\varphi),$$

再代入 Clebsch–Gordan 系数的具体数值得

$$\left.\begin{aligned}\cos\theta Y_{lm}(\theta,\varphi)&=-\sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1,m}(\theta,\varphi)\\&\quad+\sqrt{\frac{(l+1-m)(l+1+m)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1,m}(\theta,\varphi),\\\sin\theta e^{\pm i\varphi}Y_{lm}(\theta,\varphi)&=\pm\sqrt{\frac{(l\mp m)(l-1\mp m)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1,m\pm1}(\theta,\varphi)\\&\quad\mp\sqrt{\frac{(l+1\pm m)(l+2\pm m)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1,m\pm1}(\theta,\varphi).\end{aligned}\right\}(8.14)$$

现在考察势能为中心对称的 Schrödinger 方程的解(为了简单,只考察1个粒子的情况)。把(2.1)用极坐标来表示則为

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)-\frac{L^2}{r}\psi-\frac{2m}{\hbar^2}(E-U(r))\psi=0.\qquad(8.15)$$

这里 $L^2$ 是(8.2)所給出的关于 $\theta,\varphi$ 的算符。令 $\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y(\theta,\varphi)$，則(8.15)可以分离变量。$R(r)$, $Y(\theta,\varphi)$ 分别

称为波函数的徑向部分与角部分。其方程分别为

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)-\frac{\lambda}{r^2}R(r)+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]R(r)=0,$$

(8.16)

$$L^2Y(\theta,\varphi)=\lambda Y(\theta,\varphi). \qquad (8.17)$$

$\lambda$ 是分离常数。由 (8.11) 知 $L^2$ 的本征値是 $l(l+1)$；它的本征函数是 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$，所以当 $\lambda=l(l+1)$，$Y(\theta,\varphi)=Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 时，$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 是 (8.17) 的解。这里 $l=0,1,2,\cdots$，$m=l,l-1,\cdots,-l$，也即 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 是 Schrödinger 方程角部分的本征解，而 $\lambda=l(l+1)$。这里 $l$ 称为角动量量子数，$m$ 称为磁量子数，决定这些的 $L_x$, $L_y$, $L_z$ 叫軌道角动量。对应于 $l=0,1,2,3,4,\cdots$ 的状态，称为 $s$、$p$, $d$, $f$, $g$, $\cdots$状态。关于波函数的徑向部分，若势能 $U(r)$ 不确定，則什么也說不上，且因 $\lambda=l(l+1)$，它随着 $l$ 改变。

如上所述，球函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ $(m=l,l-1,\cdots,-l)$ 构成了回轉群的不可約表象 $D_l$ 的基底。这里 $l$ 的值是 0 或正整数；在 §5 根据对易关系导出了不可約表象 $D_j$，而 $j$ 的值除去 0 和正整数以外还有半奇数，在这一点是不相同的。也就是說需要注意的是回轉群的无穷小算符不一定都能象 (4.9) 或 (8.1) 那样用空間坐标来表示。这种不能用空間坐标表示的角动量在量子力学里称为自旋。$j$ 的半奇数值的最簡单的情形是 $j=1/2$ 的表象，这样的例已經举过了。实际上，由实驗已确认，电子、核子(中子和质子总称为核子)的自旋都是 $\frac{1}{2}$.

## §9 張量运算

在量子力学里，各种物理量都可以用作用于状态矢量 $\psi$ 的 Hermite 算符来表示。这些量是由对空間回轉有一定的不可約变换性的分量构成的。例如前面提到的动能(标量)、角动量(矢量)

等，可以分别看做一阶不可約表象空間及三阶不可約表象空間的矢量，但是現在常用的分量变換規則和表象空間的矢量分量的变換規則有些不同。即它的分量 $T_q^k$ $(q=k, k-1, \cdots, -k)$ 和表象基底一样，可以认为对回轉 $S$ 受

$$T_q^{k\prime}=\sum_{q'} T_{q'}^k D_{q'q}^k(S) \tag{9.1}$$

的变換。分量按这样規則变換的量叫 $k$ 阶不可約張量，記为 $T^{(k)}$。若以 $T_x$, $T_y$, $T_z$ 表示通常矢量的分量，把一阶張量即矢量的分量用現在的方法来表示就成为

$$\left.\begin{aligned} T_1^1&=-(T_x+iT_y)/\sqrt{2},\\ T_0^1&=T_z,\\ T_{-1}^1&=(T_x-iT_y)/\sqrt{2}. \end{aligned}\right\} \tag{9.2}$$

用算符 $T_q^k$ 作用于 $\psi$，而令

$$\psi'=T_q^k\psi,$$

則根据无穷小算符 $J_x$, $J_y$, $J_z$ 可得

$$\begin{aligned}(J_x\pm iJ_y)T_q^k\psi&=\sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}T_{q\pm1}^k\psi\\ &\quad+T_q^k(J_x\pm iJ_y)\psi,\\ J_zT_q^k\psi&=qT_q^k\psi+T_q^kJ_z\psi.\end{aligned}$$

以上各式右边的第一項是利用 (5.10)，(5.11) 导出的。把上面两式用对易关系的形式写出則为

$$[J_x\pm iJ_y, T_q^k]=\sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}T_{q\pm1}^k, \tag{9.3}$$

$$[J_z, T_q^k]=qT_q^k. \tag{9.4}$$

以上面两式为基础，Condon–Shortley[1] 作出了关于 $k=1$ 的張量运算；Racah 作出了关于一般的 $k$ 的張量运算。

在量子力学里求出在两状态 $\psi(\alpha j m)$ 与 $\psi(\alpha' j' m')$ 間量 $T_q^k$ 的矩陣元素：

---

[1] E. U. Condon and G. H. Shortley: Theory of Atomic Spectra, Cambridge (1935).

$$(\psi(\alpha j m),\ T_q^k\psi(\alpha' j' m')) = (\alpha j m|T_q^k|\alpha' j' m') \qquad (9.5)$$

时常成問題。这里 $\psi(\alpha jm)$ 关于 $j,m$ 具有正交性。而对同一的 $j,m$ 也能有不同的状态出現，为了区别，所以用一个另外的量子数 $\alpha$，且假定 $\psi(\alpha jm)$ 关于 $\alpha$ 也具有正交性。$T_q^k\psi(\alpha' j' m')$ 对于回轉和 $\psi(kq)\psi(j'm')$ 作同样的变换，而假定把 $\psi(kq)\psi(j'm')$ 簡約为不可約成分，則它可以用与

$$D_k\times D_{j'}=\sum_J D_J \qquad (|k-j'|\leqslant J\leqslant k+j')$$

所决定的基底 $\psi(JM)$ 有同样变換規則的諸量的和来表示。从而如果不是 $j=J$，$m=M$，則(9.5)的矩陣元素为 0．即

$$|j'-k|\leqslant j\leqslant j'+k \qquad (9.6)$$

为关于 $T^{(k)}$ 的选擇規則，而且

$$m-m'=q \qquad (9.7)$$

为关于 $m$ 的选擇規則。如 §6 所述，两个回轉群的不可約表象的积的簡約，用 Clebsch-Gordan 系数比較方便。(9.5) 可由对 $T^{(k)}$ 的具体性质所决定的物理因子乘以 Clebsch-Gordan 系数得到，即

$$(\alpha jm|T_q^k|\alpha' j' m') = \frac{1}{\sqrt{2j+1}}(\alpha j\|T^{(k)}\|\alpha' j')(j'm'kq|j'kjm). \qquad (9.8)$$

按照上式分解为含有磁量子数 $m$ 的 Clebsch-Gordan 系数与不含 $m$ 的物理部分的乘积在应用上是很重要的❶。

現在举一个求物理部分的例，最簡单的例是算符 1，这是一个标量而 $k=0$，显然

$$(\alpha jm|1|\alpha' j' m') = (\psi(\alpha jm),\ \psi(\alpha' j' m'))$$
$$=\delta(\alpha,\alpha')\delta(j,j')\delta(m,m').$$

---

❶ 这里需要注意的是对于 Hermite 算符，$(\alpha' j'\|T^{(k)}\|\alpha j)=(-)^{j-j'}(\alpha j\|T^{(k)}\|\alpha' j')$ 这样的关系是定义(9.8)和 Clebsch-Gordan 系数的对称关系(6.10)的結果。

又由(9.8)得

$$(\alpha jm|1|\alpha'j'm')=(\alpha j\|1\|\alpha'j')(j'm'00|j_0'jm)/\sqrt{2j+1}$$
$$=\delta(j,j')\delta(m,m')(\alpha j\|1\|\alpha'j')/\sqrt{2j+1},$$

所以

$$(\alpha j\|1\|\alpha'j)=\sqrt{2j+1}\,\delta(\alpha,\alpha').\tag{9.9}$$

現在用同样的方法来求角动量 $\boldsymbol{J}$ 的矩陣元素。由(5.10)得

$$(\alpha jm|J_z|\alpha'j'm')=(\psi(\alpha jm),J_z\psi(\alpha'j'm'))$$
$$=m'(\psi(\alpha jm),\psi(\alpha'j'm'))$$
$$=m\delta(\alpha,\alpha')\delta(j,j')\delta(m,m').$$

又由(9.8)得

$$(\alpha jm|J_z|\alpha'j'm')=(\alpha j\|J\|\alpha'j')(j'm'10|j'1jm)/\sqrt{2j+1},$$

以 Clebsch-Gordan 系数的值代入而比較以上两式則得

$$(\alpha j\|J\|\alpha'j')=\sqrt{j(j+1)(2j+1)}\,\delta(\alpha,\alpha')\delta(j,j').\tag{9.10}$$

这样把矩陣元素分为物理部分与 Clebsch-Gordan 系数等已知因子(这叫几何部分),在应用上是很方便的。現在以量子力学体系中求跃迁几率的問題为例来說明。最初和最后的状态分别用量子数 $\alpha jm$ 和 $\alpha'j'm'$ 来决定,利用不可約張量 $T^{(k)}$,可以把跃迁几率用

$$|(\alpha'j'm'|T_q^k|\alpha'j'm')|^2$$
$$=|(\alpha'j'\|T^{(k)}\|\alpha j)|^2(j'm'kq|j'kjm)^2/(2j'+1)$$

給出。决定特定的 $m\to m'$ 跃迁强度的相对值,是 Clebsch-Gordan 系数的自乘。而要求跃迁几率的絕对值,当然須要知道物理学的部分。一个体系如果不受具方向性的外場(如电場、磁場)的作用,則能量的值与 $m$ 无关,即对 $m$ 为簡并。在这种情况下,最初状态在具有各种 $m$ 的状态上以相同的几率分布着。为了求跃迁几率,在最初的状态对 $m$ 平均,在最后的状态,求从各个 $m$ 跃迁到一切 $m'$ 的几率的和,因而跃迁几率可以用

$$\frac{1}{2j+1}\sum_{m,m'}|(\alpha'j'm'|T_q^k|\alpha jm)|^2$$
$$=\frac{1}{2j+1}\sum_{m,m'}\frac{1}{2j'+1}|(\alpha'j'\|T^{(k)}\|\alpha j)|^2(jmkq|jkj'm')^2$$

給出。右边对 $m$ 可按(6.7)来求和，对 $m'$ 求和时則有 $(2j'+1)$ 的因数出現而与分母相消。于是 $\alpha j\to\alpha'j'$ 的跃迁几率可以用

$$\frac{1}{2j+1}\sum_{m,m'}|(\alpha'j'm'|T_q^k|\alpha jm)|^2=\frac{1}{2j+1}|(\alpha'j'\|T^{(k)}\|\alpha j)|^2 \tag{9.11}$$

給出。

以下研究两个張量的积。例如有标量积、矢量积等，現在把这些积統一起来研究。两个不可約張量 $T^{(k_1)}$, $U^{(k_2)}$, 分别与 $D_{k_1}$, $D_{k_2}$ 的基底有同样的变换法則，其积可由 $D_{k_1}\times D_{k_2}=\sum D_k$ 的簡約分解为不可約張量之和，即

$$T_{q_1}^{k_1}U_{q_2}^{k_2}=\sum_k[T^{(k_1)}\times U^{(k_2)}]_q^k(k_1q_1k_2q_2|k_1k_2kq). \tag{9.12}$$

由 Clebsch-Gordan 系数的正交关系反过来求解，可得 $T^{(k_1)}U^{(k_2)}$ 乘积的 $k$ 阶不可約張量：

$$[T^{(k_1)}\times U^{(k_2)}]_q^k=\sum_{q_1,q_2}T_{q_1}^{k_1}U_{q_2}^{k_2}(k_1q_1k_2q_2|k_1k_2kq). \tag{9.13}$$

依照这个定义，标量积可用

$$(T^{(k)}\cdot U^{(k)})=\sum_q(-1)^qT_q^kU_{-q}^k$$
$$=(-1)^k\sqrt{2k+1}[T^{(k)}\times U^{(k)}]_0^0 \tag{9.14}$$

来表示。矢量积可用

$$[\boldsymbol{T}\times\boldsymbol{U}]_q=\frac{\sqrt{2}}{i}[T^{(1)}\times U^{(1)}]_q^1 \tag{9.15}$$

来表示。把前节所求的球函数积的公式用这样的記号来表示还能变得更簡单一些。改变球函数的归一化而导入

$$C_q^k(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}}Y_{kq}(\theta,\varphi) \tag{9.16}$$

使結果变得简单，(8.12)，(8.13)分别成为

$$(k_1 0 k_2 0 | k_1 k_2 k 0) C_q^k(\theta, \varphi) = [C^{(k_1)}(\theta, \varphi) \times C^{(k_2)}(\theta, \varphi)]_q^k, \quad (9.17)$$

$$C_{q_1}^{k_1}(\theta, \varphi) C_{q_2}^{k_2}(\theta, \varphi) = \sum_k (k_1 0 k_2 0 | k_1 k_2 k 0)(k_1 q_1 k_2 q_2 | k_1 k_2 k q) C_q^k(\theta, \varphi). \quad (9.18)$$

若以 $\omega$ 表示 $(\theta_1, \varphi_1)$，$(\theta_2, \varphi_2)$ 之間的角，則球函数的加法定理通常可写为

$$P_k(\cos\omega) = \sum_q \frac{4\pi}{2k+1} Y_{kq}(\theta_1, \varphi_1) \overline{Y_{kq}(\theta_2, \varphi_2)},$$

由(8.10)知 $\overline{Y}_{kq} = (-1)^q Y_{k-q}$，考虑到这个关系式再由(9.16)的定义，則可得

$$P_k(\cos\omega) = \sum_q (-1)^q C_q^k(\theta_1, \varphi_1) C_{-q}^k(\theta_2, \varphi_2) = (C_1^{(k)} \cdot C_2^{(k)}), \quad (9.19)$$

这就給出了上面的标量积的一个例子。这里 $C_1^{(k)} = C^{(k)}(\theta_1, \varphi_1)$。其他的也可以类推。

現在来求可以用两个不可約張量积表出的不可約張量的矩陣元素。根据(9.13)知

$$(\alpha j m | [T^{(k_1)} \times U^{(k_2)}]_q^{(k)} | \alpha' j' m') = \sum_{q_1 q_2} (\alpha j m | T_{q_1}^{k_1} U_{q_2}^{k_2} | \alpha' j' m')(k_1 q_1 k_2 q_2 | k_1 k_2 k q).$$

若用 $\alpha'' j'' m''$ 表示以 $U_{q_2}^{k_2}$ 作用于状态 $\alpha' j' m'$ 而出現的状态，則上式可写为

$$= \sum_{\alpha'' j'' m'', q_1 q_2} (\alpha j m | T_{q_1}^{k_1} | \alpha'' j'' m'') \cdot (\alpha'' j'' m'' | U_{q_2}^{k_2} | \alpha' j' m')(k_1 q_1 k_2 q_2 | k_1 k_2 k q)$$

$$= \sum_{\alpha'' j''} (\alpha j \| T^{(k_1)} \| \alpha'' j'')(\alpha'' j'' \| U^{(k_2)} \| \alpha' j') \cdot \sum_{m'' q_1 q_2} (j' m' k_2 q_2 | j' k_2 j'' m'')(j'' m'' k_1 q_1 | j'' k_1 j m) \cdot (k_1 q_1 k_2 q_2 | k_1 k_2 k q) / \sqrt{(2j+1)(2j''+1)},$$

再利用(7.18)的关系，就成为

$$= \sum_{\alpha''j''} (\alpha j \| T^{(k_1)} \| \alpha''j'')(\alpha''j'' \| U^{(k_2)} \| \alpha'j')$$
$$\cdot \sqrt{2k+1} W(jk_1j'k_2; j''k)(j'm'kq|j'kjm)/\sqrt{2j+1},$$

于是

$$(\alpha j \| [T^{(k_1)} \times U^{(k_2)}]^{(k)} \| \alpha'j')$$
$$= \sum_{\alpha''j''} (\alpha j \| T^{(k_1)} \| \alpha''j'')(\alpha''j'' \| U^{(k_2)} \| \alpha'j')$$
$$\cdot \sqrt{2k+1} W(jk_1j'k_2; j''k), \tag{9.20}$$

这样，$[T^{(k_1)} \times U^{(k_2)}]^{(k)}$ 就可由 $T^{(k_1)}$ 和 $U^{(k_2)}$ 矩陣元的物理部分的积来决定。例如把这个关系应用到标量积，再考虑(7.15)，(9.14)等可得

$$(\alpha jm | (T^{(k)} \cdot U^{(k)}) | \alpha'j'm')$$
$$= \sum_{\alpha''j''} (-1)^{j''-j} (\alpha j \| T^{(k)} \| \alpha''j'')(\alpha''j'' \| U^{(k)} \| \alpha'j')$$
$$\cdot \delta(j, j')\delta(m, m')/(2j+1). \tag{9.21}$$

由简約两个不可約表象积 $D_{j_1} \times D_{j_2}$ 求基底 $\psi(\alpha jm)$ 时，不可約張量常常只作用于其一部分，譬如 $\psi(j_2m_2)$，而不作用于其他部分 $\psi(j_1m_1)$。这时可求得矩陣元素如下：

$$(\alpha j_1j_2jm | U_q^k | \alpha' j_1j_2j'm)$$
$$= \sum_{m_1m_2m_2'} (j_1m_1j_2m_2 | j_1j_2jm)(j_1m_1j_2'm_2' | j_1j_2'j'm')$$
$$\cdot (\alpha j_2m_2 | U_q^k | \alpha' j_2'm_2'),$$

而利用(9.8)，根据(6.10)的对称关系加以变形，再利用 (7.18) 可得

$$(\alpha j_1j_2j \| U^{(k)} | \alpha' j_1j_2'j)$$
$$= (-1)^{j_1-j_2+k-j'} \sqrt{(2j+1)(2j'+1)}$$
$$\cdot W(j_2jj_2'j'; j_1k)(\alpha j_2 \| U^{(k)} \| \alpha' j') \tag{9.22}$$

的結果。若 $T^{(k)}$ 只作用于 $\psi(j_1m_1)$ 而不作用于 $\psi(j_2m_2)$，同样可得

$$
\begin{aligned}
&(\alpha j_1 j_2 j \| T^{(k)} \| \alpha' j_1' j_2 j') \\
&\quad = (-1)^{j_1'-j_1-k+j} \sqrt{(2j+1)(2j'+1)} \\
&\qquad \cdot W(j_1 j j_1' j'; j_2 k)(\alpha j_1 \| T^{(k)} \| \alpha' j_1').
\end{aligned} \tag{9.23}
$$

两个不可約張量 $T^{(k_1)}$, $U^{(k_2)}$ 分别作用于 $\psi(j_1 m_1)$, $\psi(j_2 m_2)$ 时，由(9.20)可知其积的不可約張量的矩陣元素的物理部分为

$$
\begin{aligned}
&(\alpha j_1 j_2 j \| [T^{(k_1)} \times U^{(k_2)}]^{(k)} \| \alpha' j_1' j_2' j') \\
&\quad = \sum_{\alpha'' j''} (\alpha j_1 j_2 j \| T^{(k_1)} \| \alpha'' j_1' j_2 j'')(\alpha'' j_1' j_2 j_2'' \| U^{(k_2)} \| \alpha' j_1' j_2' j') \\
&\qquad \cdot \sqrt{2k+1} W(j k_1 j' k_2; j'' k),
\end{aligned}
$$

而以(9.22)，(9.23)代入上式，再利用 Racah 系数的对称性加以整理，根据(7.22)关于 $j''$ 的和可以归納成 $U$-系数，即得

$$
\begin{aligned}
&(\alpha j_1 j_2 j \| [T^{(k_1)} \times U^{(k_2)}]^{(k)} \| \alpha' j_1' j_2' j') \\
&\quad = \sqrt{(2j+1)(2j'+1)(2k+1)} \sum_{\alpha''} (\alpha j_1 \| T^{(k_1)} \| \alpha'' j_1') \\
&\qquad \cdot (\alpha'' j_2 \| U^{(k_2)} \| \alpha' j_2') U \begin{bmatrix} j_1' & j_2 & j \\ j_1' & j_2' & j' \\ k_1 & k_2 & k \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{9.24}
$$

在上式中若令 $k_1=0$ 或 $k_2=0$，而参考(9.9)，(7.29)等式，则容易看出(9.24)分别归結于(9.22)，(9.23)。关于标量积，则有下式成立 ($k=0$ 时)：

$$
\begin{aligned}
&(\alpha j_1 j_2 j m | (T^{(k)} \cdot U^{(k)}) | \alpha' j_1' j_2' j m) \\
&\quad = \sum_{\alpha''} (\alpha j_1 \| T^{(k)} \| \alpha'' j_1')(\alpha'' j_2 \| U^{(k)} \| \alpha' j_2') \\
&\qquad \cdot (-1)^{j_1+j_2'-j} W(j_1 j_2 j_1' j_2'; j k) \delta(j, j') \delta(m, m').
\end{aligned} \tag{9.25}
$$

这在計算能量时常常要用到，在下一节也要用到。

## §10 多粒子系統的波函数

在§8的最后已經說明了，在中心对称的勢場中运动粒子的波函数，可以用徑向函数和角部分的球函数的积来表示，也就是可以

写为

$$\phi_{nlm_l}(\boldsymbol{r})=R_{nl}(r)\,Y_{lm_l}(\theta,\ \varphi). \tag{10.1}$$

这里 $R_{nl}(r)$ 只是动徑大小 $r$ 的函数，如果不知道势能的具体形式它就不能被决定。$n$ 叫主量子数，是为了区别同一軌道角动量 $l$ 的不同状态而导入的。上面給出的是关于粒子的軌道运动的波函数。在前面已經指明，由于电子、核子具有 $\frac{1}{2}$ 的自旋量，要表示中心对称势場中电子、核子的状态，必須指定自旋量的状态。又若以 $m_s\left(=\pm\frac{1}{2}\right)$ 表示自旋量的磁量子数，则用四个数的量子数組 $(nlm_lm_s)$ 就够了。根据 Pauli 不相容原理，在同一状态里只能有一个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子，所以在以量子数組 $(nl\,m_l\,m_s)$ 所指定的状态里只有一个电子。如果在中心对称的势場中有 1 个以上的粒子，这些粒子必定具有不同的状态 $(nlm_lm_s)$. 和这种情况相反的，遵守 Bose 統計的粒子如 $\pi$ 介子等，在同一状态中可以有任意多个存在。下面专考察遵守 Fermi 統計的电子、核子等粒子。

如果沒有外电場、外磁場的作用，而只有中心对称的势場作用时，则粒子的能量与 $m_l$, $m_s$ 无关，只由 $n$, $l$ 来决定。通常，$m_l$, $m_s$ 随着在空間里所取 $z$ 軸方向而变更，如果这样方向性的作用不存在，则能量不因 $m_l$, $m_s$ 而变更。也就是粒子状态对 $m_l$, $m_s$ 簡并。因为 $m_s=\pm\frac{1}{2}$, $m_l=l,\ l-1,\ \cdots,\ -l$, 所以具有相同的 $(nl)$ 的 $2(2l+1)$ 个状态具有相同的能量。因此只受中心对称势場作用时，$2(2l+1)$ 重簡并的 $(nl)$ 状态，从低能量状态开始順次被粒子所占据。

下面除去中心对称的势場以外还要考虑粒子的自旋-軌道相互作用 $\xi(\boldsymbol{r})\,(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l})$. 这里 $\boldsymbol{s}$ 是作用于自旋空間的自旋角动量，即回轉群的二維表象空間。$\boldsymbol{l}$ 当然是作用在軌道角动量的空間上。

如果以 $j$ 表示粒子的自旋角动量 $\frac{1}{2}$ 与軌道角动量的合成角动量，则 $j=l\pm\frac{1}{2}$，$j$ 叫做总角动量。現在来求上述的自旋-軌道相互作用的矩陣元，这可以从 $j$ 所表示的状态求得。由于关于 $lj$ 的是对角矩陣，显然可以写为

$$(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l})=(\boldsymbol{j}^2-\boldsymbol{s}^2-\boldsymbol{l}^2)/2.$$

具体的說，若以各个角动量的模的平方代入右边，可得在 $(nlj)$ 状态的自旋-軌道相互作用的期望值如下❶：

$$\begin{aligned}&\zeta_{nl}\{j(j+1)-3/4-l(l+1)\}/2\\&=\zeta_{nl}\begin{cases}l/2, & j=(l+1/2),\\-(l+1)/2, & j=(l-1/2),\end{cases}\end{aligned}\tag{10.2}$$

这里

$$\zeta_{nl}=\int_0^\infty\xi(r)\,|R_{nl}(r)|^2r^2dr.$$

如果 $\zeta_{nl}$ 是正的，$j=l-\frac{1}{2}$ 的状态比 $j=l+\frac{1}{2}$ 的状态的能量来得低；如果 $\zeta_{nl}$ 是負的則相反。比較輕的原子中的电子屬于前者。由自旋-軌道相互作用所生成能量(10.2)的差比由状态 $(nl)$ 决定的能量差要小，这样得到的由自旋-軌道相互作用所生成的能量的变化，叫做原子光譜的精細結构(关于原子光譜的詳細理論，請参考 Condon-Shortley 的书)。

根据原子核的壳层模型，由自旋-軌道相互作用所生成的能量差(10.2)和由势能决定的 $(nl)$ 的能量差，有同样的大小，如果 $\zeta_{nl}$ 是負的❷，可以用来很好地說明原子核的基态及低激发态的性质(关于原子核的壳层模型的詳細說明請参考 M. G. Mayer and J. H. D. Jensen: Elementary Theory of Nuclear Shell Model, John

❶ 利用(9.25)以 Racah 系数的值代入，当然可以得到相同的結果，在这种場合不如直接求簡单。

❷ 对于核子的自旋-軌道相互作用是否能用 $\xi(r)(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l})$ 的形式給出，还沒有得到理論的根据。

Wiley & Sons, 1955)。在这种情况或在重原子内的电子的情况，卽自旋-軌道相互作用較强时，指定勢場中粒子的状态，除上述 $(nl)$ 外还需把 $j$ 考虑在内，用三个量子数組 $(nlj)$ 来表示状态更为方便。如果不受外部的作用，与上述一样，关于 $j$ 的 $z$ 分量 $m$ 是簡并的。簡并重度是 $2j+1$。这时由(6.1)知道波函数可用

$$\psi_{nljm}=\sum_{m_s, m_l}\left(\frac{1}{2}\ m_s l m_l \left|\frac{1}{2} l j m\right.\right)\chi_{m_s}\phi_{nlm_l}(\boldsymbol{r}) \tag{10.3}$$

与 Clebsch-Gordan 系数来表示。这里 $\chi_{m_s}$ 是自旋函数。以 Clebsch-Gordan 系数的值代入，具体写出来则为

$$\left.\begin{aligned}
\psi_{nljm}&=\sqrt{\frac{j+m}{2j}}\ \chi_{\frac{1}{2}}\phi_{nlm_l=m-\frac{1}{2}}\\
&\quad+\sqrt{\frac{j-m}{2j}}\ \chi_{-\frac{1}{2}}\phi_{nlm_l=m+\frac{1}{2}}\quad\left(j=l+\frac{1}{2}\right),\\
\psi_{nljm}&=-\sqrt{\frac{j+1-m}{2j+2}}\ \chi_{\frac{1}{2}}\phi_{nlm_l=m-\frac{1}{2}}\\
&\quad+\sqrt{\frac{j+1+m}{2j+2}}\ \chi_{-\frac{1}{2}}\phi_{nlm_l=m+\frac{1}{2}}\quad\left(j=l-\frac{1}{2}\right).
\end{aligned}\right\} \tag{10.4}$$

一个以上的粒子，在同一勢場中运动时，必須把各个粒子的角动量合成而求出粒子系統的总角动量 $\boldsymbol{J}$。在自旋-軌道相互作用較强时，若采用方便的状态指定方法 $(nlj)$，則系統的总角动量 $\boldsymbol{J}$ 的合成方法可用

$$\boldsymbol{s}_k+\boldsymbol{l}_k=\boldsymbol{j}_k,\quad \sum_k \boldsymbol{j}_k=\boldsymbol{J} \tag{10.5}$$

来表示。这样的合成方法称为 $jj$ 耦合。在自旋-軌道相互作用較弱时，則分别求各个粒子的合成自旋角动量与軌道角动量，再由所得的結果求总角动量，卽

$$\sum_k \boldsymbol{s}_k=\boldsymbol{S},\quad \sum_k \boldsymbol{l}_k=\boldsymbol{L},\quad \boldsymbol{S}+\boldsymbol{L}=\boldsymbol{J}. \tag{10.6}$$

这样的合成方法称为 $LS$ 耦合（或称为 Russel-Saunders 耦合）。

在求多粒子波函数时，开始先考虑两个粒子的情况。如果是 $jj$ 耦合，各个粒子的波函数可由(10.3)或(10.4)給出。两个粒子所占有的状态 $(n_1l_1j_1)$，$(n_2l_2j_2)$ 不同时，根据 Fermi 統計，对于粒子的置换，二粒子系統的归一化波函数必須是反对称的。考虑到这一点，对于 $m_1=j_1, j_1-1, \cdots, -j_1$, $m_2=j_2, j_2-1, \cdots, -j_2$ 可得

$$\begin{aligned}\Psi(j_1m_1j_2m_2)\\ &=\{\psi_1(j_1m_1)\psi_2(j_2m_2)-\psi_2(j_1m_1)\psi_1(j_2m_2)\}/\sqrt{2}, \quad (10.7)\end{aligned}$$

这里 $\psi_i(j_km_k)$ 是第 $i$ 个粒子在 $j_km_k$ 状态的波函数。为了简单，省去了 $(nlj)$ 中的 $n$, $l$. 从(10.7)把系統的总角动量 $\boldsymbol{J}$ 变为不可約的表象时，则由 §6 有

$$\begin{aligned}\Psi(j_1j_2JM)&=\sum_{m_1,m_2}(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2JM)\\ &\cdot\{\psi_1(j_1m_1)\psi_2(j_2m_2)-\psi_2(j_1m_1)\psi_1(j_2m_2)\}/\sqrt{2} \quad (10.8)\end{aligned}$$

成立。但是 $|j_1-j_2|\leqslant J\leqslant j_1+j_2$. 当两个粒子占有同一 $(nlj)$ 时，(10.8) 就不能成立。根据 Pauli 不相容原理，(10.8) 反映了 $m_1=m_2$ 是禁止状态，$m_1=m_2$ 时(10.8)为 0. 把(10.8)的右边第二項 $m_1$, $m_2$ 的和变换，再利用 Clebsch-Gordan 系数的对称关系(6.10)的第一式，可得

$$\begin{aligned}\Psi(jjJM)&=\sum_{m_1,m_2}\{1+(-1)^J\}\\ &\cdot(jm_1jm_2|jjJM)\psi_1(jm_1)\psi_2(jm_2)/\sqrt{2}.\end{aligned}$$

这个波函数还沒有正确地归一化。很明显能归一化的波函数是

$$\begin{aligned}\Psi(j^2JM)&=\sum_{m_1,m_2}\{1+(-1)^J\}/2\\ &\cdot(jm_1jm_2|jjJM)\psi_1(jm_1)\psi_2(jm_2). \quad (10.9)\end{aligned}$$

需要注意的是 $J$ 虽然满足 $0\leqslant J\leqslant 2j$ 的三角条件，但不能为奇数值，(10.9)只对于 0 或比 $2j$ 小的偶数值才具有意义。这是为了使

两个粒子进入同一 $(n\,l\,j)$ 的軌道由 Pauli 不相容原理而引起的。現在由比較在(10.7)和(10.9)的表象中独立波函数的总数来确定上述事实。在(10.7)表象中，独立的波函数的总数等于从 $2j+1$ 个 $m$ 中取出两个相异的 $m$ 的組合数，即 $\binom{2j+1}{2}=(2j)\cdot(2j+1)/2$，而在(10.9)表象中，对于各个 $J$ 有 $2J+1$ 个 $M$ 存在，而 $J=0,2,\cdots,2j-1$，所以独立的波函数的总数是

$$\sum_{J=0,2,\cdots,2j-1}(2J+1)=\sum_{n=0}^{j-\frac{1}{2}}(4n+1)=(2j)\cdot\left(j+\frac{1}{2}\right).$$

这与上面的結果一致。如果要直接看出只有偶数 $J$ 出现的情况，象表 10.1 那样，考察两个粒子占据 $m_1$, $m_2$ 状态的方法就可以了。由于两个粒子是完全同等的，編号的方法是任意的，不失一般性可令 $m_1>m_2$。第一行是两个粒子的总角动量 $z$ 的分量 $M=m_1+m_2$，第二、三行是在 Pauli 不相容原理的条件下 $m_1$ 和 $m_2$ 可能取得的值，最后一行給出了关于各个 $M$ 可能的角动量 $J$ 的值。例如当 $M=2j-2$ 时，独立的 $(m_1, m_2)$ 的組也只有一个，所以在 $J=2j-1$

表 10.1

| $M$ | $m_1$ | $m_2$ | $J$ |
|---|---|---|---|
| $2j-1$ | $j$ | $j-1$ | $2j-1$ |
| $2j-2$ | $j$ | $j-2$ | $2j-1$ |
| $2j-3$ | $j$<br>$j-1$ | $j-3$<br>$j-2$ | $2j-1$<br>$2j-3$ |
| $2j-4$ | $j$<br>$j-1$ | $j-4$<br>$j-3$ | $2j-1$<br>$2j-3$ |
| $2j-5$ | $j$<br>$j-1$<br>$j-2$ | $j-5$<br>$j-4$<br>$j-3$ | $2j-1$<br>$2j-3$<br>$2j-5$ |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ |

的状态以外，就沒有新状态 $J=2j-2$ 出現的余地。同样，$M=2j-4$, ⋯ 也成立，$J$ 只能出現于与 $2j-1, 2j-3, 2j-5$, ⋯ 等相隔一个的偶数值，以至 $J=0$ 为止。

下面考察 $LS$ 耦合中的二粒子系統。这时首先求自旋角动量与軌道角动量的合成

$$\left.\begin{aligned}\psi(SM_S)&=\sum_{m_s, m_s'}\left(\frac{1}{2}m_s\frac{1}{2}m_s'\,\middle|\,\frac{1}{2}\frac{1}{2}SM_S\right)\\&\qquad\cdot\chi_1(m_s)\chi_2(m_s'),\\\psi(LM_L)&=\sum_{m_l, m_l'}(lm_llm_l'|llLM_L)\cdot\phi_1(lm_l)\phi_2(lm_l').\end{aligned}\right\}\quad(10.10)$$

把这两个函数再合成，就可以得到总角动量 $J$ 状态的波函数。現在考察关于自旋的波函数 $\psi(SM_S)$ 的粒子置换和軌道波函数 $\psi(LM_L)$ 的粒子置换的結果。和考察 $jj$ 耦合一样，很容易知道，当 $S=1$ 时 $\psi(SM_S)$ 不变，当 $S=0$ 时 $\psi(SM_S)$ 的符号改变(依照 $M_S$ 的总数分别称为三重态，独态)。当粒子置换时，如果 $L$ 是偶数，$\psi(LM_L)$ 则不变，如果 $L$ 是奇数，$\psi(LM_L)$ 的符号改变。所以当两个粒子置换时使总波函数改变符号的条件是

$$S=0,\ L=\text{偶数}\quad\text{或}\quad S=1,\ L=\text{奇数}.$$

由此可知，在满足 Pauli 原理的 $l^2$ 配置內，被許可的状态必定是 $S+L=$ 偶数。用考察 $jj$ 耦合的方法也可以导出同样的結果。

下面考察在同一軌道 $(nlj)$ 內有三个粒子的情况。(10.9) 給出了两个粒子的反对称化的波函数。以这个結果为基础作出三个粒子的波函数。对一、二两粒子用 (10.9) 的波函数，由 (10.9) 和第三个粒子波函数作出三个粒子的波函数

$$\begin{aligned}&\psi(j^2(J')jJM)\\&\quad=\sum_{M'm_3}(J'M'jm_3|J'jJM)\psi_{12}(J'M')\psi_3(jm_3),\end{aligned}\quad(10.11)$$

则可得全系統的角动量 $JM$ 的状态。对于第一、二两粒子的置换，(10.11) 确实是反对称的；对于第三个粒子和其他两粒子的置换是

不是反对称的可以用 § 7 的方法来考察，即从(10.11)把角动量的合成顺序作如下的变更就可以知道了。首先把第二、第三粒子合成作出 $J''$，再把 $J''$ 和第一粒子的角动量合成作出 $J$. 这时如果 $J''$ 以奇数值出現，則可知对于第二与第三粒子的置换不是反对称的。因为角动量的合成与 $M$ 无关，这里暂时不写 $M$. 对(10.11)施以上述变换則成为

$$\psi(j^2(J')jJ)=\sum_{J''}\langle jj(J')jJ\,|\,j,jj(J'')J\rangle\psi(j,jj(J'')J),\quad(10.12)$$

显然在一般情况下，$J''$ 并不限于偶数值和 0. 作出关于(10.11)的波函数的 $J'$ 的适当的綫性組合，就可以得到寻求对第二个粒子和第三个粒子置換为反对称的波函数的方法(因为对第一第二粒子的置換是反对称的，如果对第二第三粒子的置換是反对称的，則对第一、第三粒子的置換也是反对称的)。按照 Racah 記号把波函数写为

$$\Psi(j^3J)=\sum_{J'}\psi(j^2(J')jJ)(j^2(J')jJ\,|\}\,j^3J),\quad(10.13)$$

这个系数叫做部分由来系数 (coefficient of fractional parentage)(簡写为 cfp)。把(10.13)的 $\psi(j^2(J')jJ)$ 按(10.12)变換，再把 $\psi(jjj(J'')J)$ 中 $J''$ 的奇数系数以 0 代替，就可以得到满足 cfp 的条件，即

$$\sum_{J'}\langle jj(J')jJ\,|\,jjj(J'')J\rangle(j^2(J')jJ\,|\}\,j^3J)=0$$
$$(J''=\text{奇数}).\quad(10.14)$$

把(10.14)看成决定 $j^3$ 配置的 cfp 的齐次綫性方程組，求出这个方程組的解就可以决定对三个粒子所有的置換为反对称的波函数(10.13)。为了(10.13)是归一化的，必需

$$\sum_{J'}(j^2(J')jJ\,|\}\,j^3J)^2=1.\quad(10.15)$$

这样的方法可以推广到軌道 $j$ 内有 $n$ 个粒子的 $j^n$ 配置。假定

关于$j^{n-1}$配置的各个状态的 cfp 是已知的，而且假定$j^n$配置状态$\alpha J$的波函数可用 cfp 表为

$$\Psi(j^n\alpha J)=\sum_{\alpha',J'}\psi(j^{n-1}(\alpha'J')j^nJ)(j^{n-1}(\alpha'J')jJ|\}j^n\alpha J),\tag{10.16}$$

这里$\alpha$代表$J$以外的量子数,关于这个問題，以后再稍加考察（当然这里省略了$M$）。利用关于母状态$j^{n-1}(\alpha'J')$的 cfp，并以$j^{n-2}$配置的状态加以展开，(10.16)就可以写为

$$\Psi(j^n\alpha J)=\sum_{\alpha',J',\alpha'',J''}\psi(j^{n-2}(\alpha''J'')j_{n-1}(J')j^nJ)$$
$$\cdot j^{n-2}(\alpha''J'')jJ'|\}j^{n-1}\alpha'J')(j^{n-2}(\alpha'J')jJ|\}j^n\alpha J).$$

和$n=3$时一样，把第$n-1$个粒子和第$n$个粒子的角动量合成而作出$J'''$，再使$J'''$和$J''$合成而作出总的$J$来。如果(10.16)的$\Psi(j^n\alpha J)$是完全反对称的波函数,在这种方式下奇数的$J'''$必須为 0，于是关于$j^n$配置状态的 cfp 所满足的方程組当为

$$\sum_{\alpha'J'}\langle J''j(J')jJ|J'',jj(J''')J\rangle(j^{n-2}(\alpha''J'')jJ'|\}j^{n-1}\alpha'J')$$
$$\cdot(j^{n-1}(\alpha'J')jJ|\}j^n\alpha J)=0\quad(J'''=\text{奇数}).\tag{10.17}$$

我們希望(10.16)的$\Psi(j^n\alpha J)$是归一化的,同时在$j^n$配置中属于同一的$J$的状态有一个以上时，如果能使表示这些状态的波函数互相正交的話就很便利了,所以要附加下面的条件:

$$\sum_{\alpha',J'}(j^{n-1}(\alpha'J')jJ|\}j^n\alpha J)(j^{n-1}(\alpha'J')jJ|\}j^n\alpha''J)$$
$$=\delta(\alpha,\alpha'').\tag{10.18}$$

由 (10.17)，(10.18) 决定的 cfp，当然决定不了各个$j^n\alpha J$状态的共同位相。

对于 $LS$ 耦合，也能用同样的方法求得反对称的多粒子系統的波函数。但是需要同时考虑$S$和$L$两个合成角动量，所以比上述的$jj$耦合要复杂一些。也就是說，和 (10.16) 相对应的关系式是

$$\Psi(l^n\alpha SL)=\sum_{\alpha'S'L'}\psi(l^{n-1}(\alpha'S'L')lSL)$$
$$\cdot(l^{n-1}(\alpha'S'L')lSL|\}l^n\alpha SL), \qquad (10.19)$$

用导出(10.17)的方法，可以导出关于(10.19)的 cfp 的齐次方程組。但是在 $LS$ 耦合中，同一軌道內的两个粒子的反对称状态是由条件 $S+L=$ 偶数給出的，所以有

$$\sum_{\alpha'S'L'}\langle S''L''l(S'L')lSL|S''L'', ll(S'''L'''), SL\rangle$$
$$\cdot(l^{n-2}(\alpha''S''L'')lS'L'|\}l^{n-1}\alpha'S'L')(l^{n-1}(\alpha'S'L')lSL|\}l^n\alpha SL)=0$$
$$(S'''+L'''=\text{奇数}) \qquad (10.20)$$

成立。这里的变换系数，是把关于自旋角动量和軌道角动量的各个变换系数的乘积綜合起来写出的。最初 Racah 导入 cfp 是为了在原子光譜上的应用，而是 $LS$ 耦合的情况。这里为了說明簡单起見，先考虑了 $jj$ 耦合。同时近几年来，原子核的壳层結构研究很盛行，$jj$ 耦合有种种的应用，因此以 $jj$ 耦合为重点来叙述了。至于 Racah 对 $LS$ 耦合的研究，則請参看原論文(Phys. Rev., 63(1943) p. 60)。$jj$ 耦合与 $LS$ 耦合几乎可以同样討論，以下比較复杂的証明省略了，对照 Racah 論文中 $LS$ 耦合的証明，就可以导出。

在求 $j^n$ 配置的 cfp 时，$n$ 可以取的值当然是 0, 1, 2, …, $2j+1$，对于具有接近于 $2j+1$ 的 $n$ 的配置 $j^n$，如果不知道所有比 $2j+1$ 小的 $n$ 的 cfp，一般就不能計算。但是当 $n=2j+1$ 时，在每一个磁量子数 $m$ 的状态，都有一个粒子存在，因而只有 $J=0$ 的状态才能存在，从被除去的这些粒子出发来考虑問题就簡单了。这种从 $j^{2j+1}$ 的完全滿的配置中除去一部分粒子的場合，有时称为穴配置。例如 $j^{2j+1-n}$ 配置，設想为有 $n$ 个穴存在，且可以用 $j^{-n}$ 表示。由于 $j^{-n}$ 配置中空的 $m$ 分布与 $j^n$ 配置中滿的 $m$ 的分布是完全一致的，所以可使 $j^{-n}\alpha'j'$ 状态和 $j^n\alpha J$ 状态对应。这两种状态的 cfp 之間有

$$(j^{-n}(\alpha J)jJ'|\}j^{-(n-1)}\alpha'J')$$
$$=(-1)^{J+J'-j}\left[\frac{n(2J+1)}{(2j+2-n)(2J'+1)}\right]^{\frac{1}{2}}(j^{n-1}(\alpha'J')jJ|\}j^n\alpha J) \tag{10.21}$$

关系式成立。如果能知道到 $n\leqslant j+\frac{1}{2}$ 为止的 $j^n$ 配置状态的 cfp，利用这个关系就可以知道后半的 $j^n$ 配置 $\left(n>j+\frac{1}{2}\right)$ 状态的 cfp.

从决定 $j^n\alpha J$ 状态的 cfp 的(10.17)去实际計算 cfp 就成为是求齐次方程系的根，因而是很复杂的。为了避免复杂的計算，用下述方法来求 cfp 有时就比較方便。首先从(10.16)的右边，由波函数的正交性解出 cfp 则得

$$(j^{n-1}(\alpha'J')jJ|\}j^n\alpha J)=(\psi(j^{n-1}(\alpha'J')j_nJ),\ \Psi(j^n\alpha J)). \tag{10.22}$$

右边的 $\Psi(j^n\alpha J)$ 用完全反对称的而且是总角动量 $J$ 的波函数

$$\Psi(j^n\alpha J)=N^{-1}(\alpha J;\ \alpha''J'')\left(1-\sum_{i=1}^{n-1}P_{i,n}\right)\psi(j^{n-1}(\alpha''J'')j_nJ)$$

代入。这里的 $P_{i,n}$ 是使第 $i$ 个粒子与第 $n$ 个粒子置换的置换算符。$N(\alpha J;\alpha''J'')$ 是归一化因数，其値因 $\alpha J$ 和 $\alpha''J''$ 的取法而异。以这个函数代入(10.22)则得

$$N(\alpha J;\ \alpha''J'')(j^{n-1}(\alpha'J')jJ|\}j^n\alpha J)=\delta(\alpha'J',\ \alpha''J'')$$
$$-\sum_{i=1}^{n-1}(\psi(j^{n-1}(\alpha'J')j_nJ),\ P_{in}\psi(j^{n-1}(\alpha''J'')j_nJ)).$$

把右边的第二項中的 $j^{n-1}$ 配置状态用 $j^{n-2}$ 配置状态展开，把第 $i$ 个粒子的波函数括出来之后再用算符 $P_{i,n}$ 的性质来整理，上式就成为

$$N(\alpha J;\alpha''J'')(j^{n-1}(\alpha'J')jJ|\}j^n\alpha J)=\delta(\alpha J,\ \alpha''J'')$$
$$-(n-1)\sum_{\alpha'''J'''}(j^{n-1}\alpha'J'\{|j^{n-2}(\alpha''J'')jJ')(-1)^{J'+J''-J'''-j}$$
$$\cdot\langle jJ'''(J')jJ|j,J'''j(J'')J\rangle(j^{n-2}(\alpha'''J''')jJ''|\}j^{n-1}\alpha''J''), \tag{10.23}$$

如果已知关于 $j^{n-1}$ 配置状态的 cfp 和归一化因数 $N(\alpha J;\alpha''J'')$ 就可以求得关于 $j^n\alpha J$ 的 cfp. $N(\alpha J;\alpha''J'')$ 可以用条件(10.18)来决定。在这种情况下，各个状态的固有位相也不能决定。当 $n=3$ 时上面的結果就变得特别簡单。$J$ 只能为偶数，从(10.9)知道可令 $(j^1(j)jJ|\}j^2J)=1$，又由于 $n-2=1$，所以 $\alpha'''J'''$ 只能是 $J=j$，因而不需要求和了，(10.23)可以写为

$$N(\alpha J;J'')(j^2(J')jJ|\}j^3\alpha J)$$
$$=\delta(J',J'')-(-1)^{J'+J''-j-J}2\langle jj(J')jJ|j,jj(J'')J\rangle. \quad (10.24)$$

$N(\alpha J;J'')$ 也很容易計算，結果是

$$N^2(\alpha J;J'')=3\{1+(-1)^{J-j}2\langle jj(J'')jJ|j,jj(J'')J\rangle\}. \quad (10.25)$$

与 $j^n$ 配置有相同角动量的状态可以有一个以上，所以在(10.16)中附加了一个量子数 $\alpha$. 用(10.17)，(10.18)的方法，在原理上可以求得 cfp 而且能給出互相正交的波函数組，但是还不知道这样求得的波函数所对应的状态。Racah 为了确定波函数所对应的状态，导入了一个便利的量子数，即先行数(seniority number)。$jj$ 耦合可以看成如下的标量算符 $q_{12}$:

$$(j^2JM|q_{12}|j^2JM)=(2j+1)\delta(J,0). \quad (10.26)$$

在 $j^2$ 配置中，只有当 $J=0$ 时算符 $q_{12}$ 才不为 0. 在 $j^n$ 配置状态中，求出 $Q=\sum_{k<l}q_{kl}$ 的期望值，这个不为 0 的期望值的状态可以說在 $j^{n-2}$ 配置中已經出現了，这是因为如果在 $j^n\alpha J$ 的状态 $Q$ 的期望值不为 0 时，在 $j^2$ 配置中必包含 $J=0$ 的状态，因而就有把它括出来后的 $j^{n-2}\alpha J$ 的状态存在。这样依次减少两个粒子，結合着对应状态求期望值，而在到了使 $Q=0$ 的 $j^v\alpha J$ 时就可以求得粒子数 $v$、这个粒子数叫做先行数(seniority number)。也有用先行数不能完全分类的場合，为此留下一个多余的量子数 $\alpha$，把状态用 $j^n\alpha vJ$ 来表示。用这个表象来求 $Q=\sum_{k<l}q_{kl}$ 的期望值則得

$$Q(n,v)=(n-v)(2j+3-n-v)/2, \quad (10.27)$$

$Q$的值由$nv$决定,与其他量子数无关。$jj$耦合中的先行数与$2n+1$阶的耦对群(symplectic group)表象有密切的关系,这里不作介紹($LS$耦合的$l^n$配置的先行数与$2l+1$阶的回轉群表象有关)。

由先行数的定义,可以知道$j^n\alpha vJ$状态的本质不外乎是对$j^v\alpha vJ$状态附加$(n-v)/2$个$J=0$的核子对,所以考虑先行数对求cfp也很有用处。由此可知$j^n\alpha vJ$的cfp与$j^v\alpha vJ$的cfp有如下的关系:

$$\left.\begin{aligned}&(j^{n-1}(\alpha'v'J')jJ|\}j^n\alpha vJ)=0\quad(v\neq v'\pm1),\\&(j^{n-1}(\alpha'v-1J')jJ|\}j^n\alpha vJ)\\&\quad=[v(2j+3-n-v)/n(2j+3-2v)]^{\frac{1}{2}}\\&\qquad\cdot(j^{v-1}(\alpha'v-1J')jJ|\}j^v\alpha vJ),\\&(j^{n-1}(\alpha'v+1J')jJ|\}j^n\alpha vJ)=(-1)^{J+j-J'}\\&\qquad\cdot[(v+1)(n-v)(2J'+1)/n(2j+1-2v)(2J+1)]^{\frac{1}{2}}\\&\qquad\cdot(j^v(\alpha vJ)jJ'|\}j^{v+1}\alpha'v+1J').\end{aligned}\right\}\tag{10.28}$$

例如先行数为0, 1, 2的状态間的cfp用(10.28)就可以简单地求得。可以令$(j^0(00)jj|\}j^11j)$, $(j^1(1j)j0|\}j^200)$, $(j^1(1j)jJ|\}j^22J)$ ($J=$整数$\neq0$)为1,代入上式的右边则可以得到关于先行数較小状态的简单的一般公式:

$$\left.\begin{aligned}&(j^{n-1}(1j)j0|\}j^n00)=1,\\&(j^{n-1}(00)jj|\}j^n1j)=[(2j+2-n)/n(2j+1)]^{\frac{1}{2}},\\&(j^{n-1}(2J)jj|\}j^n1j)\\&\quad=-[2(n-1)(2J+1)/n(2j-1)(2j+1)]^{\frac{1}{2}},\\&(j^{n-1}(1j)jJ|\}j^n2J)=[2(2j+1-n)/n(2j-1)]^{\frac{1}{2}}.\end{aligned}\right\}\tag{10.29}$$

本节所考察的关于多粒子系的情况,其应用要在以下各节中說明。

## §11 二体相互作用所产生的能量

如同前节所詳述,在中心对称場内运动的粒子系統的波函数,

可由一个粒子的波函数的积反对称化求得。到現在为止完全沒有考虑粒子的相互作用，对这种情况应当怎样考虑就是以下所要研究的問題。如果粒子間的相互作用很弱，在量子力学中普通采用微扰論来考虑这种影响。如果粒子間的相互作用很强，与势能有相同程度影响时，用微扰論計算的結果是收斂性很坏或甚至发散而失去意义。但是用微扰論也說明了很多关于原子內电子以及原子核內核子的实驗事实。在本节中专考察用微扰論計算能量的方法。

关于三个以上粒子同时作用的多体問題，到現在也沒有得到实驗的根据。因此这里专考察二体問題。可以当作二体力来考虑的有二体的自旋-軌道相互作用，張量作用，与自旋状态无关只与粒子間距离有关的作用(也可以称为中心力)等。在电子間作用的二体的自旋-軌道相互作用在理論上是可能的，但影响很小；在核子間也可能存在着这种相互作用，关于詳細情形还沒有得到实驗的結果，而且很复杂，不易处理，所以在这里不予考虑。在理論上电子間可能存在着張量相互作用，但是影响很小，然而核子間的張量相互作用的存在已經被証实了。普通所考虑的相互作用，是与自旋角动量的状态无关的中心力。在电子間有众所周知的 Coulomb 力作用，在核子間也确实有中心力的作用。

首先考察簡单的中心力。以$(r_1, \theta_1, \varphi_1)$，$(r_2, \theta_2, \varphi_2)$表示1，2粒子的位置，距离$r=\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\omega}$。这里 $\cos\omega=\cos\theta_1\cos\theta_2-\sin\theta_1\sin\theta_2\cos(\varphi_1-\varphi_2)$。中心力$V(r)$只是$r$的函数。利用 Legendre 系数的正交性，把$V(r)$关于$P_k(\cos\omega)$ $(k=0, 1, 2, \cdots)$展开，則有

$$V(r)=\sum_{k=0}^{\infty}V_k(r_1, r_2)P_k(\cos\omega) \tag{11.1}$$

的形式。$V_k(r_1, r_2)$只是$r_1$，$r_2$的函数，而且

$$V_k(r_1, r_2)=\frac{2k+1}{2}\int_{-1}^{1}V(r)P_k(\cos\omega)d(\cos\omega). \tag{11.2}$$

关于$V_k(r_1,r_2)$ 的具体例子，有 Coulomb 相互作用 $V(r)=\frac{1}{r}$，这种相互作用可以用

$$V_k(r_1,r_2)=r_<^k/r_>^{k+1} \tag{11.3}$$

給出。$r_<$ 表示 $r_1$，$r_2$ 中較小者，$r_>$ 表示 $r_1$，$r_2$ 中較大者。对湯川型的相互作用 $V(r)=e^{-kr}/r$，則为

$$V_k(r_1,r_2)=(2k+1)\frac{K_{k+1/2}(kr_>)I_{k+1/2}(kr_<)}{\sqrt{r_>}\sqrt{r_<}}. \tag{11.4}$$

$r_<$，$r_>$ 与 Coulomb 作用中的 $r_<$，$r_>$ 的意义一样，$K_{k+1/2}$，$I_{k+1/2}$ 表示締合 (associated) Bessel 函数。近距离相互作用的极限可以用 $\delta$ 函数来表示，对这种类型的相互作用則为

$$V_k(r_1,r_2)=\frac{2k+1}{2}\cdot\frac{\delta(r_1-r_2)}{r_1r_2}. \tag{11.5}$$

求二粒子系統由中心力所产生的能量比較簡单。若以 $l_1l_2SL$ 为指定的状态，由于互相作用和自旋无关，所以关于 $J$ 簡并的值就可以决定了。如果先不考虑粒子的置换，則一般中心力(11.1)的徑向部分积分为

$$F^k=\iint_0^\infty V_k(r_1,r_2)R^2_{n_1l_1}(r_1)R^2_{n_2l_2}(r_2)r_1^2r_2^2dr_1dr_2, \tag{11.6}$$

这种积分叫做直接积分。为了求在 $l_1l_2SL$ 的状态能量的直接积分的系数，依球函数加法定理(9.19)作如下的变形：

$$(l_1l_2L|P_k(\cos\omega)|l_1l_2L)=(l_1l_2L|(C_1^{(k)}\cdot C_2^{(k)})|l_1l_2L). \tag{11.7}$$

再应用(9.25)可得如下的結果：

$$\begin{aligned}&(l_1l_2L|P_k(\cos\omega)|l_1l_2L)\\&=(l_1\|C^{(k)}\|l_1)(l_2\|C^{(k)}\|l_2)(-1)^{l_1+l_2-L}W(l_1l_2l_1l_2;Lk).\end{aligned} \tag{11.8}$$

如果考虑粒子的置换，徑向部分的积分就成为

$$G^k=\iint_0^\infty R_{n_1l_1}(r_1)R_{n_2l_2}(r_2)V_k(r_1,r_2)R_{n_1l_1}(r_2)R_{n_2l_2}(r_1)r_1^2r_2^2dr_1dr_2. \tag{11.9}$$

用 § 10 所述的同样手續来計算

$$(-1)^{-S+l_1+l_2-L}(l_1l_2L\,|\,P_k(\cos\omega)\,|\,l_2l_1L)$$

就可求得这个积分的系数，用求(11.8)的方法可得

$$\begin{aligned}(-1)^{l_1+l_2-S-L}&(l_1l_2L\,|\,P_k(\cos\omega)\,|\,l_2l_1L)\\&=(-1)^{l_1+l_2-S}(l_1\|C^k\|l_2)(l_2\|C^{(k)}\|l_1)W(l_1l_2l_2l_1;Lk)\\&=(-1)^S(l_1\|C^{(k)}\|l_2)^2W(l_1l_2l_2l_1;Lk).\qquad(11.10)\end{aligned}$$

第二关系式是依照 33 頁的脚注求得的。把 (7.13) 的关系应用于(11.10)，再利用 Racah 系数的对称性，就可以把(11.10)改写为

$$\begin{aligned}(-1)^S&(l_1\|C^{(k)}\|l_2)^2(-1)^{l_1+l_2-L}\\&\cdot\sum_r(-1)^r(2r+1)W(l_1l_1l_2l_2;rk)W(l_1l_2l_1l_2;Lr).\end{aligned}$$

如果对矩陣元素导入 $(l\|u^{(r)}\|l')=\delta(l,l')$ 的单位張量，則(11.10)

$$\begin{aligned}(-1)^S(l_1\|C^{(k)}\|l_2)^2&\sum_r(-1)^r(2r+1)W(l_1l_1l_2l_2;rk)\\&\cdot(l_1l_2L\,|\,u_1^{(r)}\cdot u_2^{(r)}\,|\,l_1l_2L)\end{aligned}$$

和給出直接积分系数的(11.7)的形式相似。如果同时考虑自旋部分，利用 Dirac 算符 $-\left[\frac{1}{2}+2(s_1\cdot s)\right]$ 的期望值恰好为 $(-)^S$ 的性质就可以了。結果是求交換积分系数(11.10)，归終于用求直接积分的同样方法来計算

$$\begin{aligned}-\left[\frac{1}{2}+2(s_1\cdot s_2)\right](l_1\|C^{(k)}\|l_2)^2&\sum_r(-1)^r(2r+1)\\&\cdot W(l_1l_1l_2l_2;rk)(u_1^{(r)}\cdot u_2^{(r)})\qquad(11.11)\end{aligned}$$

便可以求得的。这种方法在多粒子系統求交換积分的系数时也是很常用的，在式中还有 $(l_1\|C^{(k)}\|l_2)$ 等出現．这也可以用 Clebsch-Gordan 系数来表示，以 $C_q^{(k)}(\theta,\varphi)$ 乘(8.13)再积分就可以得到

$$(l_1\|C^{(k)}\|l_2)=\sqrt{2l_2+1}\,(l_20k0\,|\,l_2kl_10).\qquad(11.12)$$

由(6.13)可知，如果不是 $l_1+l_2-k=$ 偶数，則(11.12)的值为 0.

下面求关于二粒子系統的$jj$耦合的能量。直接积分(11.6)的系数是

$$(j_1j_2J\,|\,P_k(\cos\omega)\,|\,j_1j_2J)$$
$$=(j_1\|C^{(k)}\|j_1)(j_2\|C^{(k)}\|j_2)(-1)^{j_1+j_2-J}W(j_1j_2j_1j_2;\,Jk),\tag{11.13}$$

交換积分(11.9)的系数是

$$(-1)^{1+j_1+j_2-J}(j_1j_2J\,|\,P_k(\cos\omega)\,|\,j_2j_1J)$$
$$=(-1)^{j_1+j_2}(j_1\|C^{(k)}\|j_2)^2W(j_1j_2j_1j_2;\,Jk).\tag{11.14}$$

与求$LS$耦合时相比較，$(j_1\|C^{(k)}\|j_2)$等比$(l_1\|C^{(k)}\|l_2)$复杂。利用$C^{(k)}$不作用于自旋角动量的性质，由(9.22)就可以求得$(j_1\|C^{(k)}\|j_2)$的値，即若用

$$(j_1\|C^{(k)}\|j_2)=(-1)^{\frac{1}{2}-l_1+k-j_1}\sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)}$$
$$\cdot W\left(l_1j_1l_2j_2;\,\frac{1}{2}\,k\right)(l_1\|C^{(k)}\|l_2)\tag{11.15}$$

来表示就可以算出它的値。这里$l_1$，$l_2$分別为$j_1$，$j_2$的軌道角动量。如果把(11.15)变形，就可以用Clebsch-Gordan系数来表示。由Racah系数的对称性和(11.12)，再把(7.18)反过来使用可得

$$(j_1\|C^{(k)}\|j_2)=(-1)^{\frac{1}{2}-l_1+k-j_1}\sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)}\cdot\sqrt{\frac{2l_2+1}{2(2k+1)}}$$
$$\cdot\sum_{m=\pm\frac{1}{2}}\left(l_2\,0\,j_2m\,|\,l_2\,j_2\frac{1}{2}\,m\right)\left(\frac{1}{2}m\,j_1-m\,|\,\frac{1}{2}\,j_1l_10\right)$$
$$\cdot(j_2m\,j_1-m\,|\,j_2j_1k0).$$

对$m=\pm\frac{1}{2}$求和很簡单。为把这个和实际求出，由Clebsch-Gordan系数的对称性(6.10)和(10.4)可得

$$\left(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,l0\,\middle|\,\frac{1}{2}lj\,\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\frac{2j+1}{2(2l+1)}},\tag{11.16}$$

再利用(11.16)就得到

$$(j_1\|C^{(k)}\|j_2)=(-1)^{j_2-\frac{1}{2}}\sqrt{\frac{(2j_1+1)(2j_2+1)}{2k+1}}\left(j_1\frac{1}{2}j_2-\frac{1}{2}\middle|j_1j_2k0\right). \tag{11.17}$$

但是保証 $(l_1\|C^{(k)}\|l_2)$ 不为 0 的条件是 $l_1+l_2-k=$ 偶数，如果沒有这样的条件，(11.17) 就成为 0。除去这个条件，只用 $j_1, j_2$ 就可以表示 (11.17)，結果和 (11.13)，(11.14) 一样。于是在 $jj$ 耦合中，由 $V(r)$ 产生的能量，除去通过积分所生的影响外，完全由 $j_1, j_2$ 决定，与 $l_1$, $l_2$ 无关。

到現在为止专考虑了如 $V(r)$ 所示的只与二粒子間距离有关的相互作用，但是把作为 (11.11) 的一部分出現的标量积 $(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2)$ 考虑在內，$V(r)$ 的計算也是一样的，不发生任何困难。

在 (11.1) 中是把 $V(r)$ 按 $P_k(\cos\omega)$ 来展开的，为了从 (11.8) 等式子求出能量的实际值，經常需要关于 $k$ 来求和。在一般情况下，$F^k$, $G^k$ 等由 $V(r)$ 的具体形式所决定，而含有这些量的和一般是不可能的。但是在 $\delta$ 函数型相互作用时，由 (11.5) 可得下列的简单关系：

$$F^k=(2k+1)F^0,\ F^0=\frac{1}{2}\int_0^\infty R^2_{n_1l_1}(r)R^2_{n_2l_2}(r)r^2dr, \tag{11.18}$$

这时对 $k$ 求和是可能的。現在对 $LS$ 耦合的 (11.18) 来求这个和。以 (11.12)，(11.18) 代入

$$(l_1l_2L|V(r)|l_1l_2L)$$
$$=\sum_k(l_1\|C^{(k)}\|l_1)(l_2\|C^{(k)}\|l_2)(-1)^{l_1+l_2-L}W(l_1l_2l_1l_2;Lk)F^k$$

而利用 Clebsch–Gordan 系数及 Racah 系数的对称关系，恰好变形为可使用 (7.20) 的形式，这样就可以对 $k$ 求和，而結果是

$$(l_1l_2L|V(r)|l_1l_2L)=\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{(2L+1)}(l_10l_20|l_1l_2L0)^2F^0. \tag{11.19}$$

在 $jj$ 耦合中，对 $k$ 求和虽然复杂一些，但这也是可行的。把相互

作用稍微一般化一些，且考虑

$$V_{12}=\{V_0+V_1(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\}\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2),$$

在一般情况下可求得非对角型的能量矩陣如下：

$$\begin{aligned}(j_1j_2J|V|j_1'j_2'J)&=(-1)^{l_2+l_2'+j_2-j_2'}\frac{\sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_1'+1)(2j_2'+1)}}{2(2J+1)}\\&\cdot\Big[\{(V_0+V_1)-(1+(-1)^{l_1'+l_2'-J})2V_1\}\\&\cdot\left(j_1\tfrac{1}{2}j_2-\tfrac{1}{2}\Big|j_1j_2J0\right)\left(j_1'\tfrac{1}{2}j_2'-\tfrac{1}{2}\Big|j_1'j_2'J0\right)\\&+(-1)^{l_2+l_2'+j_2-j_2'}(V_0+V_1)\\&\cdot\left(j_1\tfrac{1}{2}j_2\tfrac{1}{2}\Big|j_1j_2J1\right)\left(j_1'\tfrac{1}{2}j_2'\tfrac{1}{2}\Big|j_1'j_2'J1\right)\Big]F^0.\end{aligned}\tag{11.20}$$

考虑粒子置换时，从上式可得比較簡单的表达式：

$$\begin{aligned}&(j_1j_2J|V|j_1'j_2'J)+(-1)^{1+j_1'+j_2'-J}(j_1j_2J|V|j_2'j_1'J)\\&=(-1)^{l_2+l_2'+j_2-j_2'}\cdot\frac{1+(-1)^{l_1'+l_2'-J}}{2}\\&\cdot\frac{\sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_1'+1)(2j_2'+1)}}{2J+1}\\&\cdot\left(j_1\tfrac{1}{2}j_2-\tfrac{1}{2}\Big|j_1j_2J0\right)\left(j_1'\tfrac{1}{2}j_2'-\tfrac{1}{2}\Big|j_1'j_2'J0\right)V_sF^0.\end{aligned}\tag{11.21}$$

这里 $V_s=V_0-3V_1$，是关于独态的相互作用强度。有兴趣的是当波函数被反对称化时，$\delta$ 函数的相互作用只受满足条件 $l_1+l_2-J=$ 偶数的 $J$ 的影响。由 (11.21) 可求得在 $j_1j_2J$ 状态能量的期望值：

$$\begin{aligned}&(j_1j_2J|V|j_1j_2J)+(-1)^{1+j_1+j_2-J}(j_1j_2J|V|j_2j_1J)\\&=\frac{1+(-1)^{l_1+l_2-J}}{2}\cdot\frac{(2j_1+1)(2j_2+1)}{(2J+1)}\\&\cdot\left(j_1\tfrac{1}{2}j_2-\tfrac{1}{2}\Big|j_1j_2J0\right)^2V_sF^0,\end{aligned}\tag{11.22}$$

而在 $j^2J$ 状态的能量是

$$(j^2J|V|j^2J)=\frac{(2j+1)^2}{2(2J+1)}\left(j\,\frac{1}{2}\,j-\frac{1}{2}\middle|\,jjJ0\right)^2 V_sF^0, \tag{11.23}$$

这是在研究原子核的壳层结构时常常用到的。特别在 $j^2J=0$ 时的能量，可以看作由两个粒子构成的对能量，令(11.23)中的 $J=0$ 就可以得到它的值：

$$(j^2J=0|V|j^2J=0)=\frac{2j+1}{2}V_sF^0,\quad F^0=\frac{1}{2}\int_0^\infty R_{nl}^4(r)r^2dr. \tag{11.24}$$

求两个以上粒子的系統的能量期望值或者更一般地說求能量矩陣的方便方法是把 $\Psi(j^n\alpha J)$展开为 $j^{n-2}j^2$ 的本征函数的綫性組合，即

$$\Psi(j^n\alpha J)=\sum_{\alpha_1J_1,J_2}\psi(j^{n-2}(\alpha_1J_1)j^2(J_2)J)(j^{n-2}(\alpha_1J_1)j^2(J_2)J|\}j^n\alpha J), \tag{11.25}$$

象这样考虑的二重 cfp，就可以由下式求得：

$$\begin{aligned}(j^{n-2}(\alpha_1J_1)j^2(J_2)J|\}j^n\alpha J)\\=\sum_{\alpha'J'}\langle J_1,j^2(J_2)J|J_1j(J')jJ\rangle(j^{n-2}(\alpha_1J_1)jJ'|\}j^{n-1}\alpha'J')\\\cdot(j^{n-1}(\alpha'J')jJ|\}j^n\alpha J).\end{aligned} \tag{11.26}$$

如果能把 $\Psi(j^n\alpha J)$用(11.25)的方法展开，就能求得$(j^n\alpha J)$状态的能量，結果是

$$\begin{aligned}(j^n\alpha J|\sum_{k<l}V_{kl}|j^n\alpha' J)=\frac{1}{2}n(n-1)\sum_{\alpha_1J_1,J_2}(j^n\alpha J\{|j^{n-2}(\alpha_1J_1)j^2J)\\\cdot(j^2J_2|V|j^2J_2)(j^{n-2}(\alpha_1J_1)j^2J'|\}j^n\alpha'J),\end{aligned} \tag{11.27}$$

这里 $\frac{1}{2}n(n-1)$ 是由組合数得来的。以上是按照从 $n$ 个粒子所組成的系統中取出两个粒子的方法求出的，从 $n$ 个粒子的系統中取出$(n-1)$个粒子的方法也能求得能量，用这种方法求得的結果是

$$(j^n\alpha J|\sum_{k<l}V_{kl}|j^n\alpha' J)=\frac{n}{n-2}\cdot\sum_{\alpha_1\alpha_1'J_1}(j^n\alpha J\{|j^{n-1}(\alpha_1 J_1)jJ)$$
$$\cdot(j^{n-1}\alpha_1 J_1|\sum_{k<l}V_{kl}|j^{n-1}\alpha_1' J_1)(j^{n-1}(\alpha_1' J_1)jJ|\}j^n\alpha' J). \tag{11.28}$$

用这种方法只知道普通的cfp就可以了，所以比(11.27)少很多計算。非对角型能量矩陣的求法和(11.27)一样，可以用二重cfp来計算。

$$(j^n\alpha J|\sum_{k<l}V_{kl}|j^{n-1}(\alpha' J')j'J)$$
$$=(n-1)n^{\frac{1}{2}}\sum_{\alpha_1J_1J_2}(j^n\alpha J\{|j^{n-2}(\alpha_1 J_1)j^2(J_2)J)$$
$$\cdot(j_ij_kJ_2|V_{ik}|j_ij_k'J_2)\langle J_1,jj'(J_2)J|J_1j(J')j'J\rangle$$
$$\cdot(j^{n-2}(\alpha_1 J_1)jJ'|\}j^{n-1}\alpha' J'), \tag{11.29}$$

$$(j^n\alpha J|\sum_{k<l}V_{kl}|j^{n-2}(\alpha_1 J_1)j'^2(J_2)J)$$
$$=\left[\frac{n(n-1)}{2}\right]^{\frac{1}{2}}(j^n\alpha J\{|j^{n-2}(\alpha_1 J_1)j^2(J_2)J)(j^2J_2|V|j'^2J_2). \tag{11.30}$$

(11.27)，(11.29)，(11.30)都是使$n$粒子系統归結为2粒子系統，用計算二体的相互作用的方法計算的；但是可以想象到也有把作用于$n$个粒子之間的二体相互作用改写成便于$n$粒子系統的計算形式的方法。例如在中心力的場合，从(11.7)可以知道：求直接积分的系数就是求标量积$(C_i^{(k)}\cdot C_j^{(k)})$的矩陣元素的問題。又如$(s_i\cdot s_k)V(r)$的場合，由直接計算或者利用(9.14)，(7.21)就很容易得到

$$(s_i\cdot s_j)(C_i^{(k)}\cdot C_j^{(k)})=\sum_r(-1)^{1+k-r}(t_i^{(r)}\cdot t_j^{(r)}),$$

这里$t^{(r)}=[s\times C^{(k)}]^{(r)}$，依然可以用作用于各个粒子的算符的标量积之和来表示。一般地說，二体相互作用都能用作用于各个粒子的算符的标量积之和来表示。現在来考查$j^n$配置的二体相互作

用的能量的求法，因为粒子 $k$ 和粒子 $l$ 間的二体相互作用可以写为

$$V_{kl}=\sum_r (t_k^{(r)}\cdot t_l^{(r)})$$

的形式，所以就能得到作用于 $n$ 个粒子間的二体相互作用之和为

$$\sum_{k<l} V_{kl}=\frac{1}{2}\sum_r \{(\sum_k t_k^{(r)}\cdot\sum_k t_k^{(r)})-\sum_k (t_k^{(r)}\cdot t_k^{(r)})\}. \quad (11.31)$$

結果各項都是用关于 $n$ 个粒子对称的算符表示。如果求期望值，首先从第二項求出关于一个粒子的 $(t^{(r)}\cdot t^{(r)})$ 的期望值的 $n$ 倍。利用(9.21)从第一項可以得到

$$\begin{aligned}(j^n\alpha J|\sum_k t_k^{(r)}\cdot\sum_k t_k^{(r)}|j^n\alpha J)\\ =\sum_{\alpha'J'}(-1)^{J'-J}(j^n\alpha J\|\sum_k t_k^{(r)}\|j^n\alpha' J')\\ \cdot(j^n\alpha' J'\|\sum_k t_k^{(r)}\|j^n\alpha J)/(2J+1). \quad (11.32)\end{aligned}$$

用这样的方法就是把关于二体相互作用的計算变为一体的算符之和的矩陣元素来計算，而后者比較容易。

以前曾經考虑过：$\delta$ 函数的相互作用可以当作短距离相互作用的极限値。相反的，与粒子的波函数的扩散范圍相比較，相互作用到达的距离是很远的，所以有必要来求它的极限値。在粒子的波函数扩散范圍内，可以把粒子的相互作用的値看成常量，所以把 $V_0$，$V_1$ 当作常数，且令

$$V_{12}=V_0+V_1(s_1\cdot s_2).$$

現在考虑如何从 $\sum_{k<l} V_{kl}$ 求得 $j^n$ 配置的能量。因为第一項的和的項数只有 $n$ 个粒子間的对的个数，所以等于 $V_0\cdot n(n-1)/2$。在求第二項的和时，注意到

$$(s_k\cdot s_l)=(j_k\cdot j_l)(j\|s\|j)^2/(j\|j\|j)^2=(j_k\cdot j_l)/(2l+1)^2,$$

又因为

$$\sum_{k<l}(j_k\cdot j_l)=\{J(J+1)-nj(j+1)\}/2,$$

所以在无穷远处相互作用能量应当为

$$E(j^n\alpha J)=\frac{n(n-1)}{2}V_0+\frac{J(J+1)-nj(j+1)}{2(2l+1)^2}V_1. \quad (11.33)$$

在两个粒子的場合，$\delta$ 函数型的相互作用可以用(11.23)給出。在 $j^n$ 配置中，如果考虑到先行数的意义，就可以知道 $j^n\alpha vJ$ 的状态的能量和 $j^v\alpha vJ$ 状态的能量的关系，因为 $j^n\alpha vJ$ 的状态就是对 $j^v\alpha vJ$ 的状态附加了 $\frac{(n-v)}{2}$ 个 $J=0$ 的核子对。考虑到(11.24)，就可以得到

$$E(j^n\alpha vJ)=\frac{n-v}{2}\cdot\frac{2j+1}{2}V_sF^0+E(j^v\alpha vJ). \quad (11.34)$$

如果 $v=0,1$，则右边的第二项为0。$v=0$ 时角动量 $J$ 只能为0，所以

$$E(j^n00)=\frac{n}{2}\cdot\frac{2j+1}{2}V_sF^0 \quad (n=\text{偶数}). \quad (11.35)$$

当 $v=1$ 时，只有 $J=j$ 的状态存在，所以

$$E(j^n1j)=\frac{n-1}{2}\cdot\frac{2j+1}{2}V_sF^0 \quad (n=\text{奇数}). \quad (11.36)$$

$v$ 不为0，1时，在一般情况下 $E(j^v\alpha vJ)$ 不为0。$j^n\alpha vJ$ 的能量是由 $E(j^v\alpha vJ)$ 的内部能量与比例于对的个数 $\frac{n-v}{2}$ 的能量之和构成的，这一点是很有趣味的。在原子核的壳层結构中，普通认为核子間的相互作用是近距离的。而張量相互作用是

$$S_{12}V(r_{12})=\left\{3\frac{(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{r}_{12})(\boldsymbol{s}_2\cdot\boldsymbol{r}_{12})}{r_{12}^2}-(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2)\right\}V(r_{12}), \quad \boldsymbol{r}_{12}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2 \quad (11.37)$$

的形式。$V(r_{12})$ 只是两粒子間距离的函数。在張量相互作用中，不拘 $V(r_{12})$ 的形式如何，相互作用的能量 $E(j^n\alpha vJ)$ 总可以用(11.34)的形式給出。当然乘于 $\frac{n-v}{2}$ 的常数的值是不相同的。

## §12 一粒子算符的矩陣元素

多粒子系統的波函数，可以用§10所叙述的方法来确定。在不需要考虑波函数的反对称性时，利用§9張量运算就可以把問題归結为求作用于一个粒子算符的矩陣元素。本节考虑到波函数的反对称性，求出一粒子算符的矩陣元素，并以求核子的电磁相互作用的矩陣元素作为例題。

我們要在这里計算的，是

$$F=\sum_i f_i \tag{12.1}$$

形式的算符，$f_i$ 作用于第 $i$ 个粒子。象(12.1)那样，以一个粒子为对象时，由波函数的正交性可以知道在一个以上軌道不相同的状态間矩陣元素是0. 首先求(12.1)的期望值。如以 $k$ 为張量算符的阶数，则

$$\begin{aligned}(j^n\alpha J\|F^{(k)}\|j^n\alpha' J') &= \sum_i (j^n\alpha J\|f_i^{(k)}\|j^n\alpha' J')\\ &= n(j^n\alpha J\|f_i^{(k)}\|j^n\alpha' J'),\end{aligned}$$

令 $i=n$，以(10.16)代入，則上式变为

$$\begin{aligned}(j^n\alpha J\|F^{(k)}\|j^n\alpha' J') = n\sum_{\alpha_1 J_1} &(j^n\alpha J\{|j^{n-1}(\alpha_1 J_1)jJ)\\ &\cdot(J_1 j_n J\|f_n^{(k)}\|J_1 j_n J')(j^{n-1}(\alpha_1 J_1)jJ'|\}j^n\alpha' J').\end{aligned} \tag{12.2}$$

利用(9.22)可以把右边的中間因子用 $(j\|f^{(k)}\|j)$ 来表示。于是利用 cfp 和 Racah 系数就能把作用于 $n$ 个粒子的对称算符(12.1)的期望值用关于一个粒子的期望值来表示。用同样的方法可以把同一軌道的不同配置間的矩陣元素用关于一个粒子的矩陣元素来表示。即

$$\begin{aligned}&(j^n(\alpha_1 J_1)j'^m(\alpha_2 J_2)J\|F\|j^{n-1}(\alpha_1' J_1')j'^{m+1}(\alpha_2' J_2')J')\\ &=\sqrt{n(m+1)}\,(j^n\alpha_1 J_1\{|j^{n-1}(\alpha_1' J_1')jJ_1)\\ &\quad\cdot((J_1' j_n(J_1)J_2 J\|f_n^{(k)}\|J_1', j_n' J_2(J_2')J')\\ &\quad\cdot(j', j'^m(\alpha_2 J_2)|\}j'^{m+1}\alpha_2' J_2').\end{aligned} \tag{12.3}$$

但需要注意的是

$$(j,j^{n-1}(\alpha'J')J|\}j^n\alpha J)=(-1)^{J+J'-j}(j^{n-1}(\alpha'J')jJ|\}j^n\alpha J).\tag{12.4}$$

如果把(12.3)的右边的矩陣元素用(7.21)的$U$系数来表示，則可写为

$$(J_1'j_n(J_1)J_2J\|f_n^{(k)}\|J_1',j_n'J_2(J_2')J')$$
$$=\sqrt{(2J_1+1)(2J_2'+1)(2J+1)(2J'+1)}\,U\begin{pmatrix}j & j' & k\\ J_1 & J_2 & J\\ J_1' & J_2' & J'\end{pmatrix}\cdot(j\|f^{(k)}\|j').\tag{12.5}$$

应用§9的張量运算可以簡单地求得(12.2)，(12.3)以外的矩陣元素。

例：求$jj$耦合的先行数为1的状态的算符$\sum_i f_i^{(k)}=F^{(k)}$的期望值。

首先由(12.2)，求出

$$(j^n1j\|F^{(k)}\|j^n1j)=n\sum_{vJ}(-1)^{J+k-2j}(2j+1)W(jjjj;Jk)\cdot(j^{n-1}(vJ)jj|\}j^n1j)^2(j\|f^{(k)}\|j).$$

由(10.29)可知，和式里的$vJ$有以下的情形，即$v=0$，$J=0$和$v=2$，$J=2,4,\cdots,2j-1$。借助于$v=0$，$J=0$可得簡单的結果，即$(2j+2-n)/(2j+1)$。借助于$v=2$，$J=2,4,\cdots,2j-1$可得

$$\frac{n-1}{2j-1}\sum_{J=2,4,\cdots,2j-1}(-1)^{k-2j+J}2(2J+1)W(jjjj;Jk).$$

为了求和，先加上$J=0$，然后再減去，令$2=1+(-1)^J$就可以对所有的$J$进行求和(由$1+(-1)^J$知道对奇数$J$的和是0)。为了使Racah系数的正交性(7.10)和恒等式(7.13)可以应用，以

$$(-1)^{J-2j}=(2j+1)W(jjjj;J0)$$

代入，則借助于$v=2$得

$$\frac{n-1}{2j-1}\left\{-\frac{2}{2j+1}+(2j+1)\delta(k,0)-(-1)^k\right\},$$

把借助于 $v=0$ 和 $v=2$ 所得結果相加，則有

$$(j^n 1 j\|F^{(k)}\|j^n 1 j)$$
$$=\frac{2j-1-(1+(-1)^k)(n-1)+(n-1)(2j+1)\delta(k,0)}{2j-1}$$
$$\cdot(j\|f^{(k)}\|j). \tag{12.6}$$

或者更具体一点，則可写作

$$(j^n 1 j\|F^{(k)}\|j^n 1 j)=(j\|f^{(k)}\|j)\times\begin{cases} n, & k=0,\\ 1, & k=\text{奇数},\\ \dfrac{2j+1-2n}{2j-1}, & k=\text{偶数}\neq 0. \end{cases} \tag{12.7}$$

根据原子核的壳层結构，除去少数例外，质量数为奇数的核的基态的先行数可以看作 1，于是要求这些核在基态的一粒子算符的期望值，应用 (12.7) 可知只求出关于一个粒子的期望值就够了。

考虑电子、核子与电磁場的相互作用时，以电极矩、磁极矩的算符作用于这些粒子比較便于处理。关于核子的电 $k$ 极矩、磁 $k$ 极矩可以分别用

$$\left.\begin{aligned} \mathfrak{M}_E(k,q)&=e\sum_p r_p^k C_q^k(\theta_p,\varphi_p),\\ \mathfrak{M}_M(k,q)&=\frac{e\hbar}{2Mc}\sum_i\left(\mu_i\sigma_i+\frac{2}{k+1}g_{li}\boldsymbol{l}_i\right)\cdot\nabla_i(r_i^k C_q^k(\theta_i,\varphi_i)) \end{aligned}\right\} \tag{12.8}$$

給出。这里 $e$ 是基本电量，$e\hbar/2Mc$ 是 Bohr 核磁子，$\mu$ 是由自旋誘起的磁矩(偶极子)，$g_l=1$ (质子)，$g_l=0$(中子)，$p$ 表示对质子求和。現在求一粒子状态的这些算符的矩陣元素。关于电极矩实际已經求得了，根据(11.17)知道，它是

$$(j\|\mathfrak{M}_E(k)\|j')$$
$$=(-1)^{j'-\frac{1}{2}}\sqrt{\frac{(2j+1)(2j'+1)}{2k+1}}\left(j\frac{1}{2}j'-\frac{1}{2}\middle|jj'k0\right)$$
$$\cdot e\int_0^\infty R_j(r)r^kR_{j'}(r)r^2dr. \tag{12.9}$$

但如果 $l+l'-k$ 不是偶数，则电极矩就成为0. 另外求关于一般的 $k$ 的磁极矩矩陣元素，經过一些計算，結果为

$$(j\|\mathfrak{M}_M(k)\|j')$$
$$=(-1)^{j'-\frac{1}{2}}\sqrt{\frac{(2j+1)(2j'+1)}{2k+1}}\left(j\frac{1}{2}j'-\frac{1}{2}\middle|jj'k0\right)$$
$$\cdot\left[k+\left\{(-1)^{\frac{1}{2}+l-j}\left(j+\frac{1}{2}\right)+(-1)^{\frac{1}{2}+l'-j'}\left(j'+\frac{1}{2}\right)\right\}\right]$$
$$\cdot\left[\mu-g_l\left\{1-\frac{1}{k+1}\left[(-1)^{\frac{1}{2}+l-j}\left(j+\frac{1}{2}\right)\right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left.+(-1)^{\frac{1}{2}+l'-j'}\left(j'+\frac{1}{2}\right)\right]\right\}\right]$$
$$\cdot\frac{e\hbar}{2Mc}\int_0^\infty R_j(r)r^{k-1}R_{j'}(r)r^2dr. \tag{12.10}$$

如果 $l+l'-k$ 不为奇数，它就为0。由(9.11)可知：由状态 $j'$ 躍迁到状态 $j$ 的几率，由各极数的电极矩、磁极矩的(12.9)，(12.10)自乘，再除以 $(2j'+1)$ 即得。这时选擇規則可由(9.6)給出。

在(12.9)，(12.10) 令 $j=j'$ 就可以得到基态的电极矩、磁极矩的期望值。上面已經指明，这时具有奇数 $k$ 的电极矩和偶数 $k$ 的磁极矩不能出現。在原子核实驗中最容易观測出来的是磁偶极矩，其次是电四极矩，至于磁八极矩则只有极少数原子核能观测出来。求这些量的期望值，普通都在磁量子数的最大状态时进行。为了簡单，現在用先行数为1的状态来求，由(9.8)，(12.9)，(12.10)得

$$\mu_j=\mathfrak{M}_M(1)_j=\frac{eh}{2Mc}\cdot\frac{1+(-1)^{\frac{1}{2}+l-j}(2j+1)}{2j+2}$$

$$\cdot\left(\mu-g_l\left\{1-(-1)^{\frac{1}{2}+l-j}\left(j+\frac{1}{2}\right)\right\}\right),\qquad(12.11)$$

$$Q_j=2\mathfrak{M}_E(2)_j=\frac{2j+1-2n}{2j-1}\cdot(-1)\frac{2j-1}{2j+2}e\int_0^\infty r^2R_j^2(r)r^2dr,$$

$$(12.12)$$

$$\Omega_j=-\mathfrak{M}_M(3)_j$$

$$=\frac{3}{2}\cdot\frac{2j-1}{(2j+2)(2j+4)}\frac{3+(-1)^{\frac{1}{2}+l-j}(2j+1)}{2}$$

$$\cdot\left(\mu-\frac{g_l}{2}\left\{2-(-1)^{\frac{1}{2}+l-j}\left(j+\frac{1}{2}\right)\right\}\right).\qquad(12.13)$$

这一章的应用問題很多，这里沒有提到的而且又是特别重要的有原子核反应的角分布、核輻射的角关联等問題，由于篇幅的限制不能在这里加以論述了。

# 第3章　对称群的应用

## §13　多粒子系統的状态函数的对称性

在量子力学里，关于一个粒子的状态，是用它的状态函数 $\psi(x, y, z)$ 来表示的。或者說得更普遍一点，粒子的状态是用 Hilbert 空間 $H$ 的矢量 $\psi(q)$ 来表示的。这时在坐标 $q$ 里除去空間坐标 $x,y,z$ 外还包括"粒子的内部自由度坐标"。例如表示电子的自旋，核子（质子及中子）的自旋，电荷自旋的状态这一类变数，就是所謂内部自由度坐标。如果考虑到自旋（包括电荷的自旋）可以用2維幺正空間 $U_2$ 的矢量来表示，就可以知道空間 $H$ 是 $F\times U_2$ 或 $F\times U_2\times U_2$，这里 $F$ 是由 $x, y, z$ 的函数集合构成的'函数空間'（$L_2$ 空間）。

由 $n$ 个粒子构成的系統的状态，可以用空間 $H^n=H\times H\times\cdots\times H$ 里的矢量 $\psi(q_1, q_2, \cdots, q_n)$ 来表示。如果以 $\{\phi(\alpha_i)\}$ 为 $H$ 里的归一化正交系：

$$(\phi(\alpha_i), \phi(\alpha_j))=\delta_{ij}\quad (i, j=1, 2, \cdots), \tag{13.1}$$

則

$$\psi=\phi_1(\alpha_1)\phi_2(\alpha_2)\cdots\phi_n(\alpha_n) \tag{13.2}$$

构成 $H^n$ 中的幺正基底。这里 $\phi_i(\alpha_j)$ 表示在 $\phi(\alpha_j)$ 的自变数中代入了 $q_i$ 所得的函数。[把通常写为 $\phi_{\alpha_j}(q_i)$ 的函数中 $\alpha$ 和 $q$ 互相更换而省略 $q$ 就成为上面的写法了。例如中心力場中的状态函数写为 $\phi(n,j,m)$ [1]]。以 (13.2) 形式的状态函数为基本的近似計算，在量子力学里叫一体近似法。

[1] 再簡化一点，还可以写为 $(\alpha_j)$。

以上所討論的全是关于不同种类的粒子的集合，如果 $n$ 个粒子全部都是等同粒子，例如电子的集合，就需要作进一步的考察了。因为构成这样集合的粒子本来完全一样，沒有方法加以区别，把它用 $1, 2, \cdots, n$ 的編号来区別根本沒有意义。因此把 $\psi(q_1, q_2, \cdots, q_n)$ 里的自变数任意置换，所表示的状态也和原来完全一样。換句話說，必須作出这样的理論，即当取 $P$ 为 $1,2,\cdots,n$ 的任意置換时，$\psi$ 与 $P\psi$ 表示不能識別的状态。由此可以得出由等同粒子构成的系統状态具有一定的对称性的結論。

这里把 $P\psi$ 再明确地定义一次，例如以 $P$ 为 $1\to2, 2\to3, 3\to1$ 的置換，則由(3.4)給出的定义得

$$P\psi(q_1, q_2, q_3)=\psi(q_3, q_2, q_1). \tag{13.3}$$

这就是在 $\psi(q_1, q_2, q_3)$ 里，把 $q_1$ 移到 $q_2$ 的位置，把 $q_2$ 移到 $q_3$ 的位置，把 $q_3$ 移到 $q_1$ 的位置。称 $P: 1\to1', 2\to2', \cdots, n\to n'$ 为置換算符，具有把 $q_1$ 移到 $q_{1'}$ 的位置，……，把 $q_n$ 移到 $q_{n'}$ 的位置的意义[需要注意的是上面的例子和 $P\psi=\psi(q_2, q_3, q_1)$ 不同]。

$n$ 个事物的置換 $P$ 的全体，构成对称群 $S_n=S[1, 2, \cdots, n]$。把 $S_n$ 的元素以适当的順序排列再加上标号：

$$P_1=I\ (\text{单位元素}),\ P_2, \cdots, P_{n!}, \tag{13.4}$$

于是可以得到与此相对应的 $n!$ 个矢量：

$$P_1\psi(=\psi),\ P_2\psi, \cdots, P_{n!}\psi. \tag{13.5}$$

$\psi$ 具有(13.2)的形式，而假定在 $\alpha_i$ 里沒有相等的，則

$$(P\psi, Q\psi)=\delta(P, Q), \tag{13.6}$$

于是 $\{P\psi\}$：(13.5) 就构成 $H^n$ 里的归一化正交系。以这些矢量所张成的空間用 $R$ 来表示。如果令 $QP=T\ (P, Q, T\in S_n)$，則

$$T\psi=QP\psi=Q(P\psi), \tag{13.7}$$

所以 $S_n$ 的算符 $Q$ 能使 (13.5) 发生置換 [$Q$ 使 $P\psi\to T\psi$]，也即

(13.7)成为以$\{P\psi\}$为基底的空間$R$里的$S_n$的表象❶。这叫做正則表象$\mathscr{R}$. 对于算符$S_n$, 表象空間$R$当然是不变的，其中包含更小的不变子空間$R'$, $R'$的基底可以由$R$的基底(13.5)构成如下:

$$\psi_i=\sum_P a(P)P\psi \tag{13.8}$$

($i=1, 2, \cdots, f$, $f$是$R'$的維数, $a(P)$是由$P$决定的数)。于是对于$S_n$的算符$P$, 基底只在以1到$f$的范圍内受到綫性变换:

$$P\psi_i=\sum_{k=1}^{f}\psi_k v_{ki}(P). \tag{13.9}$$

矩陣$\{[v_{ik}(P)]\}$是算符$P$对于空間$R'$的矢量上表象。也就是群$S_n$的表象矩陣。

在这些基底里，大家熟悉的是以下二种:

$$\left.\begin{aligned}\psi_s&=N_s\sum_P P\psi(q_1, \cdots, q_n) \quad (\text{对称状态}),\\ \psi_a&=N_a\sum_P \varepsilon(P)P\psi(q_1, \cdots, q_n) \quad (\text{反对称状态}),\end{aligned}\right\} \tag{13.10}$$

这里$N_s$, $N_a$是归一化因子，

$$\varepsilon(P)=\begin{cases}1 & (P\text{为偶置换时}),\\ -1 & (P\text{为奇置换时}).\end{cases} \tag{13.11}$$

这些都具有

$$P\psi_s=\psi_s, \quad P\psi_a=\varepsilon(P)\psi_a \quad (P\in S_n) \tag{13.12}$$

的性質，分别称为对称表象及反对称表象的一維表象的基底。但是并不能从(13.12)的一般形式

$$P\psi=\pi(P)\psi \tag{13.13}$$

求得其他表象的基底。因为置换$P$不是互相可对易的，使(13.13)对所有的$P$都成立是不可能的。在对称、反对称的場合之所以能求得倒不是因这些基底都是$S_n$的“忠实”表象，而是因为这些基底都是$S_n$的“商群”$S_n/S_n$, $S_n/A_n$ ($A_n$是$n$阶交代群) 的“忠实”表

❶ 因为是么正基底間的变换，当然是么正表象。

象，而这些商群都是 Abel 群。一般地說，如有算符 $P$ 的集合，这些算符构成的不变空間是由 $P$ 的相加相乘作成的最大数的可对易算符的共同本征态来决定的。在置換的場合，由 $T=QP$ 的关系很容易把积綫性化，所以把 $P$ 的綫性組合、可对易的、互相独立的算符尽量多求就可以了。适合这个要求的是属于 $S_n$ 的共轭类 $(k_\rho)$ 的元素的和 $C_\rho=\sum P[P\in(k_\rho)]$ 的全体：

$$C_1(=I), \quad C_2, \cdots, C_p \quad (p \text{ 是 } S_n \text{ 的类数}). \tag{13.14}$$

因为对于任意的 $P\in S_n$，$PC_\rho=C_\rho P$ 都成立，所以 (13.14) 是可对易的。由此可知，它的与全体可对易的算符，在 $C_1, \cdots, C_p$ 的綫性組合以外就不存在了。因此对称、反对称以外的“一般对称性”是满足

$$C_\rho\psi=\gamma_\rho\psi \quad (\rho=1, 2, \cdots, p) \tag{13.15}$$

的矢量 $\psi$ 的集合，即 $C_\rho$ 的共同本征空間 $R_\gamma$，也可由 $(\gamma_1, \gamma_2, \cdots, \gamma_p)$ 来决定[1]。

若令 $\chi_\rho$ 为群 $G$ 的不可約表象 $\mathscr{D}$ 的特征标，則根据有限群的表象論，对于 $C_\rho=\sum P[P\in(k_\rho)]$ 的算符即对表象矩陣 $V(P)=\{v_{\alpha\beta}(P)\}$ 是

$$\sum_P V(P)[P\in(k_\rho)]=\frac{n_\rho}{f}\chi_\rho E. \tag{13.16}$$

这里 $n_\rho$ 是属于类 $(k_\rho)$ 的元素的总数，$f$ 表示 $\mathscr{D}$ 的阶数，$E$ 是 $f$ 阶的单位矩陣。以上式与 (13.15) 比較可知

$$\gamma_\rho=\frac{n_\rho}{f}\chi_\rho. \tag{13.17}$$

已經知道，群的不可約表象是由特征标来决定的，因此 $R'$ 是 $S_n$ 的

[1] 对于一般的置換 $P$，因为 $(P\varphi,\psi)=(\varphi(P^{-1}q),\psi(q))=(\varphi(q),P\psi(q))=(\varphi, P^{-1}\psi)$，所以不具有 Hermite 性。但是 $P$ 和 $P^{-1}$ 是属于同类的，所以 $(C_\rho\varphi,\psi)=(\varphi, C_\rho\psi)$．因此所有的 $\gamma_\rho$ 都是实数。这里所配述的，不过是把 $S$ 的从群代数求不变子代数改为物理的說法而已。

具有单純特征标的不可約表象的表象空間。由此可知"状态函数的对称性由 $S_n$ 的不可約表象来决定"。下面来考虑对称群 $S_n$ 及其不可約表象(但数学証明都省略了)。

在等同粒子构成的体系里，所有的量即作用于状态矢量的算符 $A$ 与置換 $P$ 是可对易的 ($A$ 是粒子的坐标 $q_i$ 的对称函数)。因此属于 $C_\rho(\rho=1, 2, \cdots, p)$ 的本征状态 $(\gamma_\rho)$ 的体系，受到任何作用也不能跃迁到其他状态 $(\gamma'_\rho)$. 这件事实，能使我們預想到各个粒子都处在一定的对称状态[处于不同对称状态的相同粒子的意义很难解释)，而实际上，电子、核子具有反对称的状态函数，$\pi$ 介子、光子具有对称状态函数。这些以外的对称性，由于不是一阶表象而具有无意义的重复度，当然不能想象它存在。这样，研究对称、反对称以外的对称性問題在原理上是沒有用处的；以后可以知道，在作近似計算时，它具有使計算簡单的用处，在实用上，也提供了有用的方法。

## §14 对 称 群

把 $n$ 个事物，以数字 1, 2, …, $n$ 来表示。把它們之間的置换記为

$$P=\begin{pmatrix}1 & 2\cdots n\\ 1' & 2'\cdots n'\end{pmatrix} \tag{14.1}$$

或

$$P:(j\to j') \quad (j, j'=1, 2, \cdots, n;\ \text{对于 } j\neq k, j'\neq k')❶. \tag{14.2}$$

$P$ 的全体构成 $n$ 阶对称群 $S=S_n$, $S_n$ 的阶数(元素的总数)为 $n!$.

在 $P$ 的元素里把 $r$ 个数字作如下的順次置換：

$$C: i_1\to i_2, \quad i_2\to i_3, \cdots, i_{r-1}\to i_r, \quad i_r\to i_1 \tag{14.3}$$

所成的 $r$ 項的循环置换記为

❶ 把置換写成(14.2)的形式，显然和空間的一点 $P$ 的一对一的变换：$T:(x\to x')$ 是对应的(变换的对象不是連續点集而是离散点集)。

$$C=(i_1i_2\cdots i_r). \tag{14.4}$$

任何置换都可以用几个不含有相同数字的循环置换的积来表示。例如

$$\begin{pmatrix}1&2&3&4&5&6&7&8\\4&8&6&5&1&3&7&2\end{pmatrix}=(7)(28)(36)(145).$$

在这样的分解里,普通把1项循环 $(i_s)=i_s\to i_s$ [上例中的7] 省略不写。

令 $P:(i\to i'),\quad Q:(i\to q_i)=(i'\to q_{i'}),$

而 $R=QPQ^{-1}:(q_i\to i\to i'\to q_{i'})=(q_i\to q_{i'}),$

所以 $R$ 是以 $Q$ 替换 $P$ 的数字而成的。于是对于循环 $C=(i_1i_2\cdots i_r)$ 有 $C'=QCQ^{-1}=(j_1j_2\cdots j_r)$ 成立 $[Q:(i_s\to j_s)]$. 这表示项数相等的循环属于同一共轭类。因此把对称群 $S_n$ 的元素分解为1项,2项,…,$n$ 项循环时,由它所包含的数 $k_1,k_2,\cdots,k_n$ 就能指定 $S_n$ 的类。現在把这些类写为

$$(k)=(k_1,k_2,\cdots,k_n), \tag{14.5}$$

这里 $k_1,k_2,\cdots,k_n$ 是滿足

$$1k_1+2k_2+\cdots+nk_n=n \tag{14.6}$$

的自然数或者是0。当 $k_\nu>0,k_{\nu+1}=\cdots=k_n=0$ 时,就可以把(14.6)簡写为:$(k_1k_2\cdots k_\nu)$. 属于类 $(k)$ 的数 $n(k)$ 可以用下式給出:

$$n(k)=\frac{n!}{1^{k_1}k_1!2^{k_2}k_2!\cdots n^{k_n}k_n!}. \tag{14.7}$$

$S_4$ 的类 $k$ 的种类以及属于各个类的元素可以用下表来表示:

表 14.1

| $(k)$ | (4000)=(4) | (2100)=(21) | (0200)=(02) | (1010)=(101) | (0001) |
|---|---|---|---|---|---|
| $n(k)$ | 1 | 6 | 3 | 8 | 6 |
| 元素 | $I$ (单位元素) | (12), (13) (14), (23) (24), (34) | (12) (34) (13) (24) (14) (23) | (123), (124) (132), (134) (142), (143) (234), (243) | (1234), (1243) (1324), (1342) (1423), (1432) |

## §15 对称群的不可約表象

对称群的不可約表象中的每一个，都由 $n$ 的分割

$$|\lambda|=[\lambda_1,\ \lambda_2,\ \cdots,\ \lambda_n] \tag{15.1}$$

$$\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_n=n,\quad \lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_n\geqslant 0 \tag{15.2}$$

賦予特征。当 $\lambda_\nu\geqslant 1$，$\lambda_{\nu+1}=\cdots=\lambda_n=0$ 时常常把 (15.1) 略記为 $[\lambda_1,\ \cdots,\ \lambda_\nu]$，而当 $\lambda_a=\lambda_{a+1}=\cdots=\lambda_{a+p}$ 时則略記为 $[\cdots\lambda_a^p\cdots]$。分割可以用大小相等的 $\lambda_1,\ \lambda_2,\ \cdots,\ \lambda_n$ 个正方形上下左右排列的图形来表示，这叫做 Young 氏图。以 $S_4$ 为例则有下列 5 种：

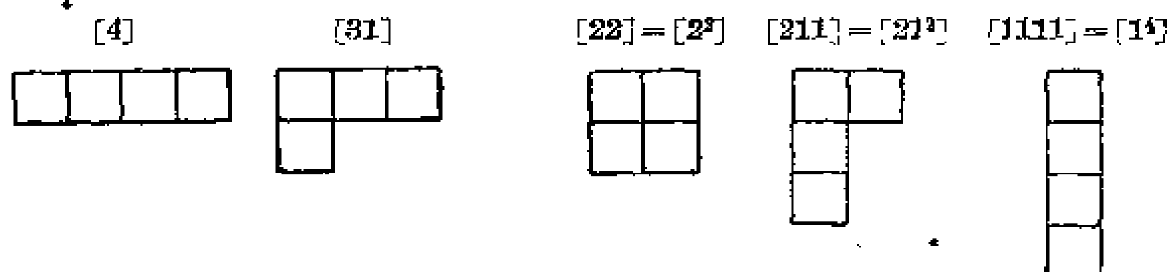



图 15.1

如果把(15.2)写为

$$(\lambda_1-\lambda_2)+2(\lambda_2-\lambda_3)+3(\lambda_3-\lambda_4)+\cdots+n\lambda_n=n,$$

因为 $\lambda_r-\lambda_{r+1}\geqslant 0$，上式的解和 (14.6) 一致，由此可知 $n$ 的分割可能的数和 $S_n$ 的类数 $n(k)$ 是一致的。

由分割 $[\lambda]$ 指定的不可約表象 $\mathscr{D}[\lambda]$ 的特征标

$$\chi_\lambda(k)\quad ([\lambda]=[\lambda_1\cdots\lambda_n],\quad (k)=(k_1\cdots k_n)\text{是 } S_n \text{ 的类}) \tag{15.3}$$

可以当作

$$D(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_m)s_1^{k_1}s_2^{k_2}\cdots s_m^{k_m} \tag{15.4}$$

展开式中的 $x_1^{\mu_1}x_2^{\mu_2}\cdots x_m^{\mu_m}$ 的系数求得。这里 $m$ 是不小于 Young 氏图中行数的自然数，$D(x_1,\ \cdots,\ x_m)$ 是 $x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_m$ 差的乘积：

$$D(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_m)=\prod_{r<s}(x_r-x_s)$$

$$
= \begin{vmatrix} x_1^{m-1} & x_1^{m-2} & \cdots & x_1 & 1 \\ x_2^{m-1} & x_2^{m-2} & \cdots & x_2 & 1 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_m^{m-1} & x_m^{m-2} & \cdots & x_m & 1 \end{vmatrix}
$$

$$
\begin{aligned}
&= (x_1 - x_2)(x_1 - x_3) \cdots\cdots (x_1 - x_m) \\
&\quad \cdot (x_2 - x_3) \cdots\cdots (x_2 - x_m) \\
&\quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
&\quad \cdot (x_{m-1} - x_m),
\end{aligned} \tag{15.5}
$$

$s_j$ 是 $x_1, x_2, \cdots, x_m$ 的 $j$ 次方的和，即

$$
s_j = x_1^j + x_2^j + \cdots + x_m^j = \sum_{r=1}^{m} x_r^j, \tag{15.6}
$$

$$
\mu_r = \lambda_r + (m - r) \quad (r = 1, 2, \cdots, m) \tag{15.7}
$$

即 $\mu_1 = \lambda_1 + m - 1, \cdots, \mu_{m-1} = \lambda_{m-1} + 1, \mu_m = \lambda_m$[因此 $\mu_1 > \mu_2 > \cdots > \mu_m$]. 表象的阶数 $f_\lambda$ 可当作单位元素 $I$ 的特征标 $\chi_\lambda(I)$ 来求：

$$
f_\lambda = \frac{n! D(\mu_1 \mu_2 \cdots \mu_m)}{\mu_1! \mu_2! \cdots \mu_m!}. \tag{15.8}
$$

把关于分割 [λ] 的 Young 氏图中行列調換所生成的分割 $[\lambda]^*$，叫做原分割的对偶表象。例如在图 15.1 中，$[21^2]$，$[1^4]$ 的表象分别为 [31]，[4] 的对偶表象。关于对偶表象的特征标有

$$
\chi_{\lambda^*}(k) = \varepsilon(k) \chi(k) \tag{15.9}
$$

关系式成立。这里的 $\varepsilon(k)$，随 $P \in k$ 的偶奇置换而为 ±1.

作为例子試求关于 $S_4$ 的单純特征标。参照图 15.1，[λ]=[4]时行数是 1，所以 $m=1$ 时 $\chi(k)=1$ 可以当作 $x^{k_1} x^{2k_2} x^{3k_3} x^{4k_4} = x^4$ 的 $x^\mu = x^4$ 的系数求得。因而对于对偶表象 $[1111]=[1^4]$ 有 $\lambda(k)=\varepsilon(k)$. 这些分别称为对称、反对称表象，而且都是一阶表象。对于 [31]，$[2^2]$，$m=2$，若令 $x_1=x$，$x_2=y$，則对表 15.1 所表示的各类 $(k)$，$(x-y)(x+y)^4$，$(x-y)(x+y)^2(x^2+y^2) = (x+y)(x^4-y^4)$，$(x-y)(x^2+y^2)^2$，$(x-y)(x+y)(x^3+y^3) = (x^2-y^2)(x^3+y^3)$，$(x-y)(x^4+y^4)$ 求 $x^4y$([λ]=[3, 1])，$x^3y^2$($[\lambda]=[2^2]$) 的系数就可以了。对于 $[\lambda]=[21^2]$ 的特征标，可以当作 [31] 的对偶表象求得之，結果如表 15.1 所示[+、−表示偶、奇置换类]。

表 15.1

| (k) \ [λ] | | [4] | [3 1] | [2²] | [2 1²] | [1⁴] |
|---|---|---|---|---|---|---|
| + | (4) | 1 | 3 | 2 | 3 | 1 |
| − | (21) | 1 | 1 | 0 | −1 | −1 |
| − | (02) | 1 | −1 | 2 | −1 | 1 |
| + | (101) | 1 | 0 | −1 | 0 | 1 |
| − | (0001) | 1 | −1 | 0 | 1 | −1 |

## §16 对称群表象的分歧律

在由 $(1, 2, \cdots, n)$ 的置换构成的 $n$ 阶对称群里，使最后的数字 $n$ 不动的置换 $Q$ 集合起来，则成 $Q=(n)Q'$ 的形式，置换 $Q'$ 属于 $S_{n-1}=S[1, 2, \cdots, n-1]$. [$(n)$ 表示1项循环：$n\to n$.] 也就是說，$\{Q\}$ 构成子群 $S_{n-1}$ (和同构群)。如果以 $S_n$ 的不可約表象 $\mathscr{D}[\lambda]$, $[\lambda]=[\lambda_1, \cdots, \lambda_n]$ 为 $S_{n-1}$ 的表象，則 $S_{n-1}$ 是可約的。[以 $G$ 的不可約表象为其子群 $H$ 的表象时，一般是可約的。] 如果这样着想，就需要考虑在 $\mathscr{D}[\lambda]$ 里含有 $S_{n-1}$ 的不可約表象 $\mathscr{D}[\lambda']$ 这样的表象各有多少。下面的分歧律就回答了这个問題。

如果令 $k(k_1, k_2, \cdots)$ 为 $Q$ 的类，則 $Q'\in S_{n-1}$ 的类因为減少了1項循环$(n)$，应当是$(k_1-1, k_2, \cdots)$. 再考虑

$$D\cdot s_1^{k_1-1}s_2^{k_2}\cdots=\sum a_{\mu_1'\mu_2'\cdots}x_1^{\mu_1'}x_2^{\mu_2'}\cdots \tag{16.1}$$

及 $\mu_1'\geqslant\mu_2'\geqslant\cdots$，面在$\geqslant$里如果有$=$，則 $a_{\mu_1'\mu_2'\cdots}=0$ (若 $\mu_p=\mu_q$ 則左边成 $x_p$, $x_q$ 的变替式，右边是对称函数)。如果有 $\mu_1'>\mu_2'\cdots$，則由(16.4)可知

$$a_{\mu_1'\mu_2'\cdots}=\chi_{\lambda_1'\lambda_2'\cdots}(Q').$$

以 $s_1=x_1+\cdots+x_m$ 乘上式，則其中的 $x_1^{\mu_1}x_2^{\mu_2}\cdots$ 的系数为

$$\chi_{\lambda_1,\lambda_2\cdots}(Q)=a_{\mu_1-1,\mu_2,\mu_3,\cdots}+a_{\mu_1,\mu_2-1,\mu_3}+\cdots, \tag{16.2}$$

由此可得

$$\mathscr{D}[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n]=\sum_r \mathscr{D}_r[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_r-1,\cdots,\lambda_n],\quad (16.3)$$

这里 $\mathscr{D}_r$ 是 $S_{n-1}$ 的关于 $[\lambda_1, \cdots, \lambda_r-1, \cdots, \lambda_{n-1}]$ 的不可約表象，右边的和只取 $\lambda_r>\lambda_{r+1}$ 的 $\mathscr{D}_r$. 就 Young 氏图来說，是意味着把比下一行长的行的最后一个方格取消，其余的每个都被包含一次。

把(16.3)右边各項再用 $S_{n-2}$ 的不可約表象的和来表示，則得

$$\sum_{r,s}\mathscr{D}_{rs}[\lambda_1, \cdots, \lambda_r-1, \cdots, \lambda_s-1, \cdots, \lambda_n].\quad (16.4)$$

但这里不在减小順序中的 $[\lambda_1, \cdots]$ 都除外。用同样的手續反复施行，最后关于 $S_2$ 元素的表象成为对称表象 $[2]$ 和反对称表象 $[1^2]$ 的一阶表象之和，即

$$\sum_{r,s,\cdots,u}\mathscr{D}_{rs\cdots u}[\lambda']\quad ([\lambda']=[2] \text{ 或 } [1^2]).\quad (16.5)$$

当 $r=r'$, $s=s'$, $\cdots$, $t<t'$, $\cdots$ 时，取 $(rs\cdots u)$ 为比 $(r's'\cdots u')$ 小的編号。若对可能的 $(rs\cdots u)$ 加上 1, 2, $\cdots$ 的編号，由这些編号就可以标志出 $\mathscr{D}[\lambda]$ 表象矩陣的行(或列)。这就相当于以 $S_{n-1}, S_{n-2}, \cdots, S_2$ 的不可約表象表示行(或列)的系統图(参考下节)。

**例** 关于 $S_5$, $\mathscr{D}[32]$. 若以 Young 氏图表示分歧律就成为图16.1的形式，因而各行的系統就成为表16.1的形式。

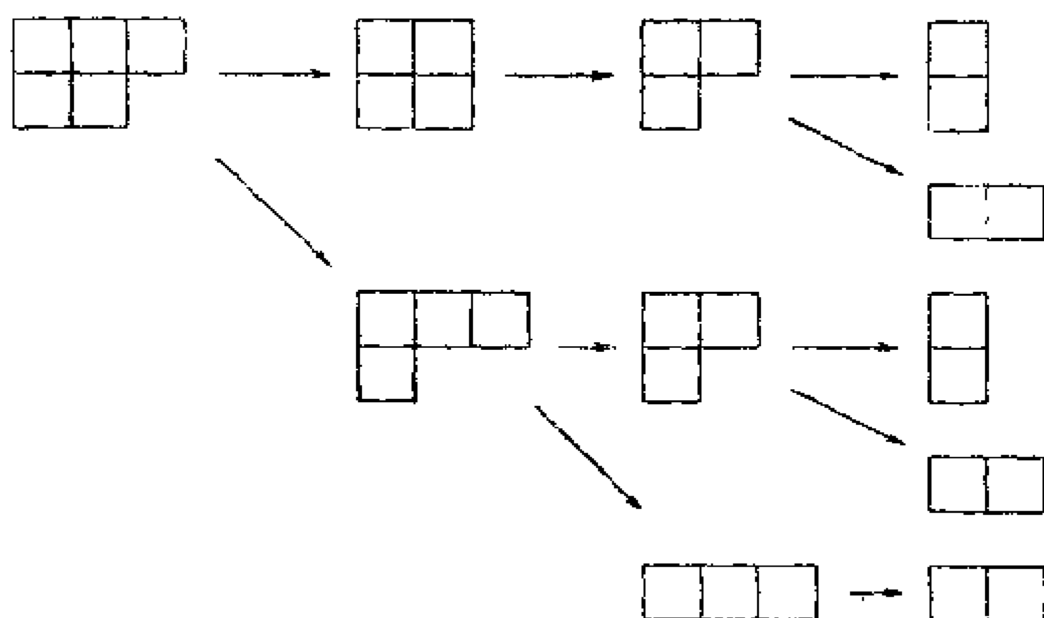


图 16.1

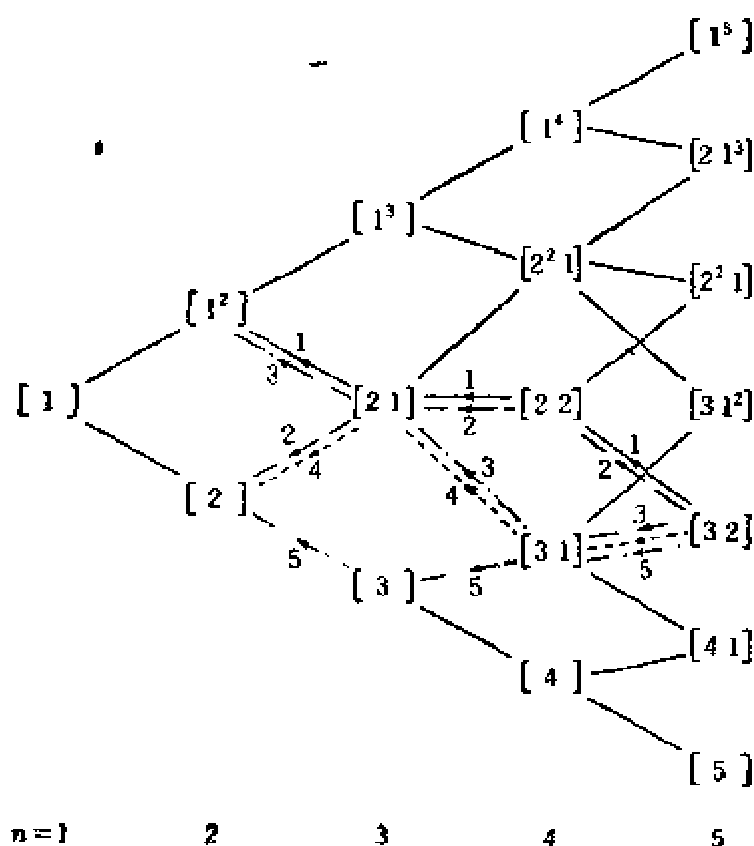



图 16.2

表 16.1

| 行 | $S_2$ | $S_3$ | $S_4$ |
|---|---|---|---|
| 1 | [1²] | [21] | [22] |
| 2 | [2] | [21] | [22] |
| 3 | [1²] | [21] | [31] |
| 4 | [2] | [21] | [31] |
| 5 | [2] | [3] | 31] |

这种形式一般可以用分歧图 (图 16.2) 来表示。在这个图里，自右至左沿上面的路綫进行就得到行(列)的編号(关于 $n=5$ 的 [32] 特别用 5 条路綫来表示)。

Jahn 把 Young 氏图里順次取消的方格的行編号排列起来，又作成系譜如图 16.1 所示，这叫 Yamanouchi symbol. 比如上例 $n=5$, $[\lambda]=[32]$ 各行可以写为

(12121)，(12211)，(21121)，(21211)，(22111)

(因为只取消了一个方格,所以最后的数字限定为 1)。从右边依反方向去讀,可以知道 5 行的系統。

## § 17 对称群的不可約么正表象的构成

现在依照前节的安排来求对称群 $S_n$ 的么正不可約表象。令 $V(P)$ 为对应于分割 $[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$ 的表象 $\mathscr{D}$ 的矩陣。对于 $Q\in S_{n-1}$❶, $\mathscr{D}$ 可以用分割

$$[\lambda_1, \cdots, \lambda_r-1, \cdots, \lambda_n] \quad (\lambda_r>\lambda_{r+1}) \tag{17.1}$$

来表示,又可以被 $S_{n-1}$ 的不可約表象 $\mathscr{D}_r$ 分开。因此 $V(Q)$ 的基底可以按照 $\mathscr{D}_1$, $\mathscr{D}_2$, $\cdots$ (其中可能的)沿对角綫形式来取。現在这种形式的 $\mathscr{D}_r$ 所占部分的行和列采用一个字 $r$ 来代表。对于 $R\in S_{n-2}$, $\mathscr{D}_r$ 又可以被

$$[\lambda_1, \cdots, \lambda_r-1, \cdots, \lambda_s-1, \cdots, \lambda_n] \tag{17.2}$$

的不可約表象 $\mathscr{D}_{rs}$ 分开。假定这些都被以 $rs$ 所表示的行列所占据,則可分为以下三种情形:

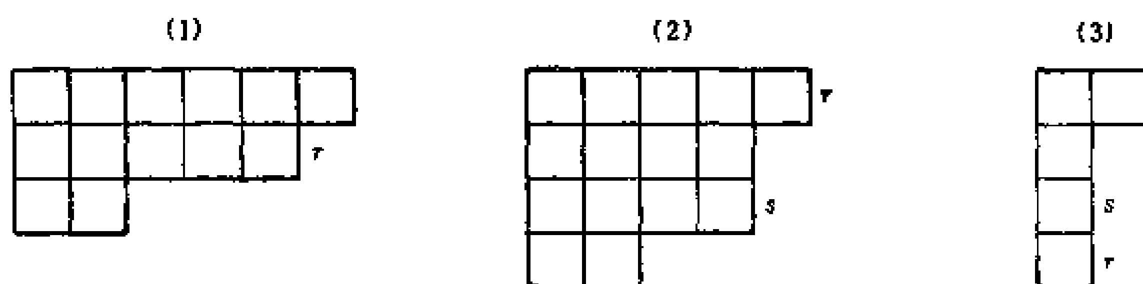



图 17.1

(1) $\mathscr{D}_{rr}$ 出現一次 $[\lambda_r>\lambda_{r+1}+1$ 时$]$。

(2) $\mathscr{D}_{rs}=\mathscr{D}_{sr}$ 出現二次 $[\lambda_r>\lambda_{r+1}, \lambda_s>\lambda_{s+1}$ 时$]$。

(3) $\mathscr{D}_{rs}$ 出現而 $\mathscr{D}_{sr}$ 不出現 [例如当 $s=r-1$, $\lambda_s=\lambda_{r-1}=\lambda_r$ 时]。

---

❶ 以下考虑 $S_{n-1}$, $S_{n-2}$, $\cdots$ 时把共通含有的 $(n)$, $(n)(n-1)$ 的一項循环省略了。

这样，$V(R)$ 的基底就可以按 $S_{n-2}$ 的不可約表象 $\mathscr{D}_{rs}$ 沿主对角綫的排列形式来取。

如果知道 $S_{n-1}$ 的不可約表象矩陣，就能求得 $V(Q)$，$Q\in S_{n-1}$，然后再求关于 $P\overline{\in} S_{n-1}$ 的 $V(P)$. 为此只須知道对換❶ $(n-1, n)$ 的表象矩陣就可以了。这是因为由

$$(i, n)=(n-1, n)(i, n-1)(n-1, n) \quad (i\leqslant n-2), \qquad (17.3)$$

若知道 $V(i, n)$ $(i=1, 2, \cdots, n-1)$，就能知道全部对換的表象矩陣，而任何置換都可用它們的积表示出来。

因为关于 $R\in S_{n-2}$ 的不可約表象 $\mathscr{D}_{rs}$ 的矩陣是

$$V_{rs, pq}(R)=V_{rs, rs}(R)\delta_{rs, pq},$$

而 $(n-1, n)$ 和 $S_{n-2}$ 的所有元素都是可对易的，所以

$$V_{rs, rs}(R)\,V_{rs, pq}(n-1, n)=V_{rs, pq}(n-1, n)\,V_{rs, pq}(R)$$

对所有的 $R\in S_{n-2}$ 都成立。于是由 Schur 引理得

$$V_{rs, pq}(n-1, n)=0 \quad (\text{除去 } pq=rs \text{ 或 } sr) \qquad (17.4)$$

$$=\lambda_{rs, rs}E_{rs, rs} \qquad (17.5)$$

$$=\lambda_{rs, sr}E_{rs, sr}, \qquad (17.6)$$

$E_{ab}$ 是 $a$ 行 $b$ 列的单位矩陣，$\lambda_{a, b}$ 是常数。于是由么正条件知，对于 (1)，(3) 有

$$|\lambda_{rs, rs}|^2=1 \qquad (17.7)$$

成立。对(2)有

$$|\lambda_{rs, rs}|^2+|\lambda_{rs, sr}|^2=1 \qquad (17.8)$$

成立。从而，如果知道 $\lambda_{rs, rs}$ 就能作出 $V(n-1, n)$.

众所周知[参照 § 13]，如果作关于对換 $(ij)$ 的全部表象矩陣之和，则得

$$\sum_{i<j=1}^{n} V(ij)=\frac{n(n-1)}{2}\,\frac{\chi}{\chi_0}\,E=\xi E. \qquad (17.9)$$

---

❶ 两項循环称为对換。

同样对于 $\mathscr{D}_r$, $\mathscr{D}_{rs}$ 有

$$\sum_{i<j=1}^{n-1} V^{(r)}(ij)=\xi_r E_r,\quad \sum_{i<j=1}^{n-2} V^{(rs)}(ij)=\xi_{rs} E_{rs}\quad (17.10)$$

成立。这里 $V^{(r)}$, $V^{(rs)}$ 是 $\mathscr{D}_r$, $\mathscr{D}_{rs}$ 的不可約表象矩陣，$E_r$, $E_{rs}$ 分别为 $r$, $rs$ 所表示的矩陣部分的单位矩陣。于是

$$\sum_{i=1}^{n-1} V(in)=\sum_{i<j=1}^{n} V(ij)-\sum_{i<j=1}^{n-1} V(ij)=A_n\qquad (17.11)$$

是沿对角綫排列的

$$(\xi-\xi_r)E_{rr}\qquad (17.12)$$

的对角矩陣。

$$\sum_{i=1}^{n-2} V(i,\,n-1)=A_{n-1}\qquad (17.13)$$

是

$$(\xi_r-\xi_{rs})E_{rs,rs}\qquad (17.14)$$

沿对角綫排列的对角矩陣。

以 $V(n-1,\,n)$ 乘于 (17.11) 的右边，则得

$$\sum_{i=1}^{n-2} V(in)V(n-1,\,n)+E=A_nV(n-1,\,n).$$

再利用(17.3)，左边的第一項成为

$$V(n-1,n)\sum_{i=1}^{n-2} V(i,\,n-1),$$

于是得

$$A_nV(n-1,\,n)-V(n-1,\,n)A_{n-1}=E.\qquad (17.15)$$

以下把 $V(n-1,\,n)$ 略記作 $V$，再加上行列的标号 $rs$, $pq$. 这样 (17.15) 就成为

$$(\xi-\xi_r)V_{rs,rs}-V_{rs,rs}(\xi_r-\xi_{rs})=E_{rs,rs},\qquad (17.16)$$

$$(\xi-\xi_r)V_{rs,sr}-V_{rs,sr}(\xi_s-\xi_{sr})=0,\qquad (17.17)$$

所以从 (17.4), (17.5) 得

$$\lambda_{rs,rs}=\frac{1}{\xi-2\xi_r+\xi_{rs}},\qquad (17.18)$$

及

$$\text{若 } \xi-\xi_r-\xi_s+\xi_{rs}=0 \text{ 不成立时 } \lambda_{rs,sr}=0. \tag{17.19}$$

这里还沒有解决的問題就是如何求$\xi$. 为求$\xi$需要知道$\frac{\chi}{\chi_0}$ [(17.9)]. 从特征标的計算(計算省略)可得

$$\xi=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n}\lambda_k(\lambda_k+1)-\sum_{k=1}^{n}k\lambda_k, \tag{17.20}$$

因而知道$\xi$是整数,从此得

$$\xi-\xi_r=\lambda_r-r. \tag{17.21}$$

对于(1)的类型:

$$\begin{aligned}\xi_r-\xi_{rr}&=\lambda_r-1-r,\\ \lambda_{rr,rr}&=1,\end{aligned} \tag{17.22}$$

对于(2)的类型:

$$\begin{aligned}\xi_r-\xi_{rs}&=\lambda_s-s,\\ \lambda_{rs,rs}&=\frac{1}{\lambda_r-\lambda_s-(r-s)}.\end{aligned} \tag{17.23}$$

对于(3)的类型($\lambda_{r-1}=\lambda_r$):

$$\lambda_{rs,rs}=-1. \tag{17.24}$$

而对于(2)的类型:

$$\lambda_{rs,rs}+\lambda_{sr,sr}=0, \tag{17.25}$$

若令

$$\rho_{rs,rs}=\lambda_r-\lambda_s-(r-s) \quad (=\text{整数}), \tag{17.26}$$

则

$$\lambda_{rs,rs}=\frac{1}{\rho_{rs,rs}}. \tag{17.27}$$

由(17.19)知道,除了$\lambda_{rs,sr}=0$外$\rho$不等于零。

由(17.8)知道,$\mathscr{D}_{rs,sr}$的非对角成分$E_{rs,sr}$的系数可以由

$$\lambda_{rs,sr}=\pm\sqrt{1-\lambda_{rs,rs}^2}=\pm\frac{\sqrt{\rho_{rs,rs}^2-1}}{|\rho_{rs,rs}|} \tag{17.28}$$

决定。± 号的取法是任意的，以下只取 + 号。由 $V^TV=E$ 及 $V^2=E$ 得 $V^T=V$，由此得

$$\lambda_{sr,rs}=\lambda_{rs,sr}.$$

这样，$V(n-1,n)$ 的矩陣，可以按图 17.2 构成。

这样作成的 $v_{ik}(P)$ 全部都是实数，而且对 $S_n$ 的全部元素，$(ik)$ 成分所含有的平方根是常数，特别是对角綫成分，可以証明它是有理数，而且 $v_{ik}v_{kj}v_{ij}=$ 有理数，因而从各行各列取出适当的平方根数 $r_1=\sqrt{a_1}$，…，$r_f=\sqrt{a_f}$，剩下的部分成分都是有理数，也就是如果按着对角矩陣 diag $(r_1,\cdots,r_f)$ 来变形，$v_{ik}$ 就全部变成有理数了。这个 $S_n$ 的不可約表象是由有理数作成的，这也是众所周知的事实。

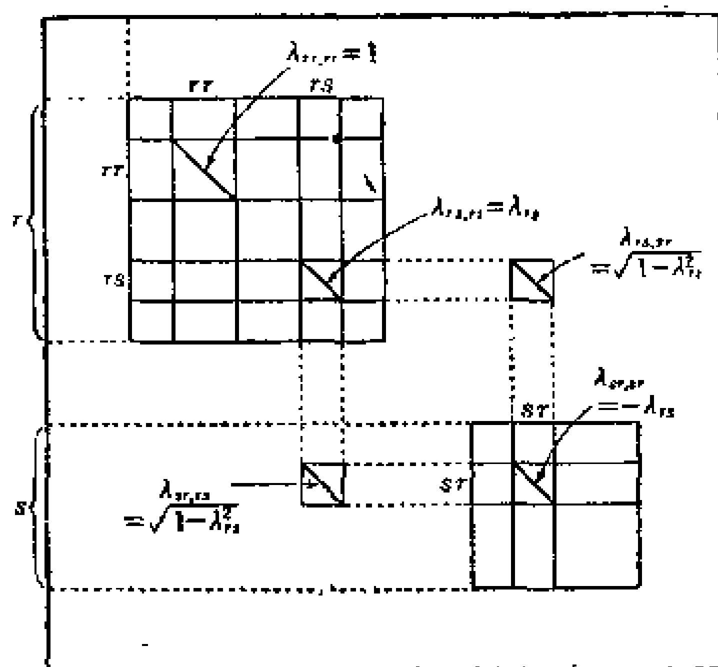


图 17.2

## §18 对称状态的基底

如果能知道对称群 $S_n$ 的不可約表象 $\mathscr{D}[\lambda]$ 的矩陣 $\{V(P)=[v_{ik}(P)]\}$，则 $\mathscr{D}[\lambda]$ 的表象空間 $R[\lambda]$ 的基底，可由 $P\psi$ 的綫性組合

$$\psi_k=\sum_P a_k(P)P\psi,\quad Q\psi_k=\sum_j \psi_j v_{jk}(Q)$$
$$(j,\ k=1,\ 2,\ \cdots,\ f_\lambda) \tag{18.1}$$

求得。为了求得 $\mathscr{D}[\lambda]$ 的基底，根据下面的説明可以取 $a_k(P)=C_\lambda v_{ik}(P^{-1})$ ($C_\lambda=C$ 是常数)，这里 $i$ 是从 1 起到 $f=f_\lambda$ 为止的任意整数。在

$$Q\psi_k=C\sum_P v_{ik}(P^{-1})QP\psi \tag{18.2}$$

里，使 $Q$ 固定，在右边对 $QP=R$ 求和。在 (13.4) 中令 $QP_i=P_{i'}$，若 $P_i\neq P_j$ 則 $P_{i'}\neq P_{j'}$ 所以 $\{P_i\}=\{P_{i'}\}$。由此可知对 $P$ 求和与对 $R=QP$ 求和，只是順序不同，其結果是一样的。根据表象条件：

$$v_{ik}(P^{-1})=v_{ik}(R^{-1}Q)=\sum_j v_{ij}(R^{-1})v_{jk}(Q)$$

可以把(18.2)写为

$$Q\psi_k=C\sum_{R,j} v_{ij}(R^{-1})R\psi v_{jk}(Q)=\sum_j \psi_j v_{jk}(Q).$$

于是 $\mathscr{D}[\lambda]$ 的基底为

$$\psi_{ik}=C\sum_P v_{ik}(P^{-1})P\psi\quad(k=1,2,\cdots,f_\lambda). \tag{18.3}$$

所謂对 $i=1,\ 2,\ \cdots,\ f_\lambda$ 求得了 $f_\lambda$ 組的基底，不外乎把周知的定理："正則表象簡約后的各个不可約表象以等于阶数的重复度出現"改換説法而已。

$n!=\sum_\lambda f_\lambda^2$。例如对 $S_4$，若作出表 20.2 的不可約表象阶数的平方和，則恰好是

$$1+3^2+2^2+3^2+1=24=4!.$$

## §19　对称状态中的物理量的矩陣成分

設由 $n$ 个等同粒子构成的系統的对称状态 $[\lambda']$，$[\lambda]$ 的基底为

$$\varphi_{ik}=C'\sum_Q w_{ik}(Q^{-1})Q\varphi,\quad \psi_{jl}=C\sum_R v_{jl}(R^{-1})R\psi. \tag{19.1}$$

$[w_{ik}(P)]$，$[v_{jl}(P)]$分别为对称群 $S_n$ 的不可約表象 $\mathscr{D}[\lambda']$，$\mathscr{D}[\lambda]$

的表象矩陣，$\varphi$，$\psi$ 是 $H^n$ 中的矢量，而且假定 $Q\varphi$（及 $R\psi$）全都是互相独立的。二状态間的量 $A$ 的矩陣成分可以用

$$(\varphi_{ik}, A\psi_{jl}) = \bar{C}'C \sum_{Q,R} \bar{w}_{ik}(Q^{-1}) v_{jl}(R^{-1}) (Q\varphi, AR\psi) \quad (19.2)$$

給出。因为 $(P\varphi, P\psi) = (\varphi, \psi)$，$AP = PA$ $(P \in S_n)$，所以

$$(Q\varphi, AR\psi) = (Q\varphi, RA\psi) = (\varphi, Q^{-1}RA\psi). \quad (19.3)$$

若令

$$A(P) = (\varphi, AP\psi), \quad (19.4)$$

則 (19.3) 成为 $A(Q^{-1}R)$，对于滿足 $Q^{-1}R = P$ 的 $Q$, $R$ 組具有相同的值❶。如果把关于 $Q$ 的和改为关于 $P$ 的和，則因

$$\bar{w}_{ik}(Q^{-1}) = w_{ki}(Q) = w_{ki}(RP^{-1}) = \sum_h w_{kh}(R) w_{hi}(P^{-1}),$$

所以，矩陣成分 (19.2) 成为

$$\bar{C}'C \sum_{P,h} w_{hi}(P^{-1}) (\varphi, PA\psi) \sum_R w_{kh}(R) v_{jl}(R^{-1}).$$

由不可約表象矩陣的正交性知道，最后的和为

$$\frac{n!}{f_\lambda} \delta_{hj} \delta_{kl} \delta_{\lambda\lambda'},$$

因此，所求的矩陣成分不是 $[\lambda'] = [\lambda]$ 便是 0（在 § 13 里已敘述过了）。当 $\varphi_{ik}$ 和 $\psi_{jl}$ 是相同的对称性状态的矢量时，若取 $|C|^2 = \frac{f_\lambda}{n!}$，則矩陣成分就成为

$$\delta_{kl} \sum_P \bar{v}_{il}(P) A(P). \quad (19.5)$$

如 § 18 所述，如果表象矩陣 $V(P) = [v_{il}(P)]$ 全是由实数构成的，在对称状态 $[\lambda]$ 中 $A$ 的矩陣可以用

$$\sum_P V(P) A(P) \quad (19.6)$$

給出。若令 $A = 1$，$\varphi = \psi$，則

---

❶ 也可以說 $(Q\varphi, RA\psi)$ 只由 $R$ 与 $Q$ 的比来决定(不精确)。

$$(\psi_{ik}, \psi_{jl}) = \delta_{kl}\Delta_{ij}, \quad \Delta_{ij} = \sum_P v_{ij}(P)(\psi, P\psi). \qquad (19.7)$$

若 $P\psi$ 全是正交的，则 $(\psi, P\psi) = \delta(P, I)$,

$$(\psi_{ik}, \psi_{jl}) = \delta_{kl}\delta_{ij}. \qquad (19.8)$$

由此可知，若以 $[v_{ik}^{(\lambda)}(P)]$ 为 $\mathscr{D}[\lambda]$ 的表象矩陣，則基底

$$\psi_{ik}^{(\lambda)} = \sqrt{\frac{f_\lambda}{n!}} \sum_P v_{ik}^{(\lambda)}(P^{-1}) P\psi \qquad (19.9)$$

构成正則表象空間 $R$ 的么正基底。

在一体近似中，$\psi = \prod_\nu \phi_\nu(\alpha_\nu)$ 时，除去用 $\phi_\nu$ 的附标 $\nu$ 表示粒子坐标 $q_\nu$ 置換外，还可以考慮"軌道" $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$ 的置換 $P^\alpha$. 令 $P: k \to k'$, 則

$$P\psi = \prod \phi_{k'}(\alpha_k), \quad P^\alpha\psi = \prod \phi_k(\alpha_{k'}),$$

所以 $P^\alpha P\psi = PP^\alpha\psi = \prod \phi_{k'}(\alpha_{k'}) = \psi$. 由此可知 $P^\alpha$ 是 $P$ 的逆置換。因此利用軌道置換 $P^\alpha$ 时，(19.6) 就可以写为

$$\sum_{P^\alpha} V(P^\alpha) A(P^\alpha), \quad A(P^\alpha) = (P^\alpha\varphi, A\psi). \qquad (19.10)$$

要求在状态 $[\lambda]$ 的量 $A$ 的本征值，必須解 $f$ 次本征方程，但是如果能知道 $\mathscr{D}[\lambda]$ 的特征标，就可以求得"本征値的和"（或平均値）。亦卽根据对角和的不变性知道，本征値的和可以用

$$\sum_P \chi(P) A(P) \qquad (19.11)$$

給出。又因为 $\chi(P^{-1}) = \chi(P)$，所以在上式中也可以用 $P^\alpha$.

## §20 有一部分对称性被指定的情形

用一体近似中取

$$\psi = \phi_1(\alpha_1)\cdots\phi_{n_1}(\alpha_1)\phi_{n_1+1}(\alpha_2)\cdots,$$

卽最初的 $n_1$ 个粒子在同一軌道 $\alpha_1$ 时，对于 $S_{n_1} = S[1, 2, \cdots, n_1]$ 有 $T\psi = \psi$ 成立。在这种情况下，在全系統对称状态 $[\lambda]$ 的 $f_\lambda$ 个基底里，只能取滿足 $T\psi = \psi$ 的基底，也卽只取使 $S_{n_1}$ 为恒等表象的基

底。在这种場合必須有 $\lambda_1 \geqslant n_1$ 的条件，而考虑在物理上的应用，以 $\lambda_1 = n_1$ 的情况为主来加以討論。

如果群 $G$ 的两个子群 $H_1$, $H_2$ 互相是可对易的，而且 $r \in H_1$, $s \in H_2$，則由 $t = rs$ 形式的元所构成的子群叫 $H_1$ 和 $H_2$ 的直积，記为 $H_{12} = H_1 \times H_2$. 若 $\mathscr{D}_1$, $\mathscr{D}_2$ 分别为 $H_1$, $H_2$ 的不可約表象，則 $\mathscr{D}_{12} = \mathscr{D}_1 \times \mathscr{D}_2$ 为 $H_{12}$ 的表象。如果 $\mathscr{D}_1$, $\mathscr{D}_2$ 代表 $H_1$, $H_2$ 不可約表象的全系，則 $\mathscr{D}_{12}$ 包含 $H_{12}$ 不可約表象的全体。这件事实可以根据下面的理由来加以証明：令 $[a_{ik}(r)] \in \mathscr{D}_1$, $[b_{jl}(s)] \in \mathscr{D}_2$, $t = rs$，則 $\mathscr{D}_{12}$ 表象矩陣为

$$c_{ij,kl}(t) = a_{ik}(r)\, b_{jl}(s),$$

从而 $\mathscr{D}_{12}$ 的特征标为

$$\chi_{12}(t) = \sum_{i,j} c_{ij,ij} = \sum_i a_{ii}(r) \sum_j b_{jj}(s) = \chi_1(r)\, \chi_2(s). \quad (20.1)$$

現在我們只就 $S_n$ 的两个可对易子群 $S_{\lambda_1} = S[1, 2, \cdots, \lambda_1]$, $S_{n-\lambda_1} = S[\lambda_1 + 1, \cdots, n]$ 来考虑，这里所要考察的是在 $S_n$ 的不可約表象 $\mathscr{D} = \mathscr{D}[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$ 里含有 $S_{\lambda_1} \times S_{n-\lambda_1}$ 的不可約表象 $\mathscr{D}_1[\lambda_1] \times \mathscr{D}_2[\lambda_2, \cdots, \lambda_n] = \mathscr{D}_0 \times \mathscr{D}'$ 几次，以及被包含部分的 $\mathscr{D}$ 的矩陣是什么样矩陣的問題。

首先由分歧律可以知道，当 $n = \lambda_1 + 1$ 时 $\mathscr{D}$ 只包含 $\mathscr{D}_0 \times \mathscr{D}'$ 一次。如果 $\mathscr{D}$ 被限定在 $S_{n-1}$ 内，則只包含 $\mathscr{D}_r = \mathscr{D}[\lambda_1, \cdots, \lambda_r - 1, \cdots]$ $(\lambda_r > \lambda_{r+1})$ 各一次，其中 $\mathscr{D}_1 = [\lambda_1 - 1, \cdots]$ 应从关于最初的 $\lambda_1$ 个对称条件中除去，其余的当 $S_{n-\lambda_1}$ 被限定在 $S_{n-\lambda_1-1}$ 内时，除去 $\lambda_1$, $\mathscr{D}'[\lambda_2, \cdots, \lambda_n]$ 和包含 $S_{n-\lambda_1-1}$ 的不可約表象 $\mathscr{D}'_r$ 相等。由此可知，如果每个 $\mathscr{D}_r$ 只包含 $\mathscr{D}_0 \times \mathscr{D}'_r$ 一次，則 $\mathscr{D}$ 也只包含 $\mathscr{D}_0 \times \mathscr{D}'$ 一次。

假設在状态 $[\lambda]$ 里，若 $S_{\lambda_1} \times S_{n-\lambda_1}$ 只由給出 $\mathscr{D}_0 \times \mathscr{D}'$ 基底間变換的表象矩陣 $\{V(P)\}$ 的部分矩陣 $\{V'(P)\}$ 来决定，則 $\mathscr{D}_0$ 是一阶的，$T\psi = \psi\,(T \in S_{\lambda_1})$，对 $S_{n-\lambda_1}$ 里的元素 $R$, $V'(R)$ 恰好等于 $\mathscr{D}'$ 的表象矩陣(其阶数为 $f'$)。由此可知，

$$V'(T)=E \quad (f' \text{阶的}) \quad (T\in S_{\lambda_1}),$$
$$V'(R)\in \mathscr{D}' \quad (R\in S_{n-\lambda_1}). \qquad (20.2)$$

而剩下的只有关于元素 $Q\overline{\in}S_{\lambda_1}\times S_{n-\lambda_1}$ 的表象矩陣 $V'(Q)$。如果知道关于对换 $(\alpha i)$ 的矩陣 $V'(\alpha i)$，就可以求得 $V'(Q)$。但 $\alpha,\beta\in\{1, 2, \cdots, \lambda_1\}$，$i$, $j\in\{\lambda_1+1, \cdots, n\}$。因为

$$(\alpha i)=(\alpha\beta)(\beta i)(\alpha\beta)=(ij)(\alpha j)(ij),$$
$$V'(\alpha\beta)=E,$$

所以

$$V'(\alpha i)=V'(\beta i), \quad \mathrm{Sp}[V'(\alpha i)]=\mathrm{Sp}[V'(\alpha j)]. \quad (20.3)$$

由此可知 $V(\alpha i)$ $(\alpha=1, 2, \cdots, \lambda_1, \ i=\lambda_1+1, \cdots, n)$ 具有相同的平均值 $\zeta$。

根据(17.9)知道，属于对易类元素的表象矩陣之和为

$$\xi E=\sum_{\alpha<\beta}V'(\alpha\beta)+\sum_{i<j}V'(ij)+\sum_{\alpha,i}V'(\alpha i)$$
$$=\{\lambda_1(\lambda_1-1)/2+\xi'+\lambda_1(n-\lambda_1)\zeta\}E.$$

又根据 (17.20) 知道 $\xi=\xi'+\lambda_1(\lambda_1-1)/2-\sum_{\nu=2}^{n}\lambda_\nu$，故

$$\zeta=\frac{-1}{\lambda_1}, \qquad (20.4)$$

从而得

$$\sum_{\alpha}V'(\alpha i)=-E. \qquad (20.5)$$

这样根据(20.3)的第一式就可把上式写为

$$\lambda_1 V'(\alpha i)=-E.$$

由此可知"$V'(\alpha i)$ 是单位矩陣的 $-\dfrac{1}{\lambda_1}$ 倍"。(20.5) 表明：如果关于最初的 $\lambda_1$ 个数字的置换是对称的，这些数字和其余的 $n-\lambda_1$ 中的一个置换的和是反对称的。[(20.5)指出由于和 $V'(R)(R\in S_{n-\lambda_1})$ 是可对易的，所以必是 $E$ 的常数倍，如果証明了这个常数值是 $-1$ 也許更明确一些。]

$\mathscr{D}'$ 中最初 $\lambda_2$ 个数字置换能再以 1 表示时，关于 $\mathscr{D}'$ 再作与上面同样的考察，且令 $\{\lambda_1+1, \cdots, \lambda_1+\lambda_2\}$, $q\in\{\lambda_1+\lambda_2+1, \cdots, n\}$，则得

$$V'(\varkappa q) = -\frac{1}{\lambda_2}\cdot E \quad (E\text{ 是 }\mathscr{D}[\lambda_3, \cdots, \lambda_n]\text{的阶数的单位陣})。$$

把这样的方法反复使用可得下面的結論:

如果最初的 $\lambda_1, \cdots, \lambda_p$ 数字置換每个都能用恒等表象表示，則关于 $\mathscr{D}[\lambda_1, \cdots, \lambda_p, \lambda_{p+1}, \cdots, \lambda_n]$ 的变換的矩陣为

$$\left.\begin{aligned} &V'(\alpha_m, \beta_m) = E, \\ &V'(i_p, j_p) = V'(i_p, j_p), \\ &V'(\alpha_m, i_m) = -(1/\lambda_m)E, \end{aligned}\right\}$$

这里 $\alpha_m$, $\beta_m$ 是 $\lambda_1+\cdots+\lambda_{m-1}+1, \cdots, \lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_m$ 里的数字，$i_m$, $j_m$ 是 $\lambda_1+\cdots+\lambda_m+1, \cdots, n$ 里的数字，$V'(i_p, j_p)$ 是 $S_{n-\lambda_1-\cdots-\lambda_p}$ 不可約表象 $\mathscr{D}'[\lambda_{p+1}, \cdots, \lambda_n]$ 的矩陣，$E$ 是单位矩陣，与 $V'(i_p, j_p)$ 具有相同的阶数。这样，如果知道 $\mathscr{D}[\lambda_{p+1}, \cdots, \lambda_n]$，就可以求得关于 $\mathscr{D}[\lambda]$ 的矩陣。也就是說，"$n$ 体問題在本质上可以归結为 $n-\sum_{v=1}^{p}\lambda_v$ 体問題"。

在 $S_{\lambda_1}, S_{\lambda_2}, \cdots, S_{\lambda_n}$ 都能用恒等表象表示的場合，則

$$\begin{aligned} \xi &= \sum V'(\alpha_m\beta_m) + \sum V'(\alpha_m i_m) \\ &= \sum \frac{\lambda_m(\lambda_m-1)}{2} - \sum_{m=1}^{n}\sum_{l=m+1}^{k}\lambda_l = \sum\lambda_m(\lambda_m+1)/2 - \sum m\lambda_m, \end{aligned}$$

这是 (17.20) 的必然結果。

把以上的結果一般化，例如假若能从 (20.1)

$$\chi_\lambda(P) = \sum_{\lambda',\lambda''} g_{\lambda'\lambda''}\chi_{\lambda'}(T)\chi_{\lambda''}(Q) \tag{20.6}$$

$$(T\in S_{n_1}, \quad Q\in S_{n-n_1}, \quad P=TQ)$$

求得 $g_{\lambda'\lambda''}$，就可知道在 $S_n$ 的表象 $\mathscr{D}[\lambda]$ 里含有几个 $S_{n_1}\times S_{n-n_1}$ 的不可約表象 $\mathscr{D}[\lambda']\times\mathscr{D}[\lambda'']$。右边的和式是对 $\mathscr{D}[\lambda']$, $\mathscr{D}[\lambda'']$ 所

有可能的全組来求的。

**例** 設 $n=4$, $S_2=\{I,(12)\}$, $S_2'=\{I,(34)\}$, 則 $\chi_{\lambda'}$, $\chi_{\lambda''}$ 及 $\chi_\lambda$ 可用下表表示❶(参照 15.1)。

表 20.1

| 类 | $P$ | [2][2] | [2][11] | [11][2] | [11][11] | [4] | [31] | [22] | [21²] | [1⁴] |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| (4) | $I\cdot I$ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 3 | 2 | 3 | 1 |
| (21) | $(12)\cdot I$ | 1 | 1 | −1 | −1 | 1 | 1 | 0 | −1 | −1 |
| (21) | $I\cdot(34)$ | 1 | −1 | 1 | −1 | 1 | 1 | 0 | −1 | −1 |
| (02) | $(12)\cdot(34)$ | 1 | −1 | −1 | 1 | 1 | −1 | 2 | −1 | 1 |
| | $g_{\lambda'\lambda''}$ | $x$ | $y$ | $z$ | $w$ | | | | | |

因此,若令关于每个 $[\lambda]$ 的 $\chi_\lambda$ 为 $a$, $b$, $b$, $c$, 則

$$
\begin{aligned}
&x+y+z+w=a, \qquad && x=\frac{a+2b+c}{4},\\
&x+y-z-w=b, && y=\frac{a-c}{4}=z,\\
&x-y+z-w=b, && \\
&x-y-z+w=c, && z=\frac{a-2b+c}{4},
\end{aligned}
$$

从这里可以求得 $g_{\lambda'\lambda''}$ 如表 20.2.

表 20.2

| | [4] | [31] | [22] | [21²] | [1⁴] |
|---|---|---|---|---|---|
| [2] [2] | 1 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| [2][1²], [1²][2] | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| [1²] [1²] | 0 | 0 | 1 | 1 | 1 |

以上的結果也可反过来使用,例如在[4],[31],[22]里各包含[2][2]一次。

同样,当 $S_{n_1}$, $S_{n_2}$, … 可用 $[\lambda']$, $[\lambda'']$, … 表示时,从

$$\chi_\lambda(P)=\sum g_{\lambda'\lambda''\cdots}\chi_{\lambda'}(T_1)\chi_{\lambda''}(T_2)\cdots \tag{20.7}$$

❶ 最初就从 $(12)\cdot I$ 和 $I\cdot(34)$, (2)[1²] 和 [1²][2] 里只取一方也可以。

可以知道它包含于 $\mathscr{D}[\lambda]$ 的次数。这里 $P=T_1T_2\cdots$，$(T_\nu\in S_{n_\nu})$。

当 $H=S_{\lambda_1}\times S_{\lambda_2}\times\cdots\times S_{\lambda_p}$ 是恒等表象时，对属于 $H$ 的元素 $T$ 有 $T\psi=\psi$ 成立，所以，(19.9) 的全体的基底并不是独立的。以 $H$ 把 $S_n$ 分为剩余类而 $S=\sum H_\alpha(H_1=H)$，从每个 $H_\alpha$ 里取出一个代表元素 $R_a$，则独立的基底是

$R_a\psi\quad(a=1,2,\cdots,n!/h,\ h$ 是 $H$ 的阶数 $=\lambda_1!\cdots\lambda_p!)$。

若依 (19.9) 用 $\{V'(P)\}$ 表象的 $n!$ 个基底 $\psi'_{ik}$ 代替 $R_a$，则得

$$\Delta_{ij}=\sum_T v'_{ik}(T)\Delta(T)\quad(T\in H)$$

$$=h\delta_{ij},$$

因此，为了使 $\psi'_{ij}$ 归一化必须除以 $\sqrt{h}=\sqrt{\lambda_1!\cdots\lambda_p!}$。

如果最初的函数 $\varphi,\psi$ 分别为置换 $H_1=S_{\lambda_1}\times\cdots\times S_{\lambda_p}$，$H_2=S_{\lambda_1}\times\cdots\times S_{\lambda_q}(n\geqslant p\geqslant q)$ 的对称函数，而同时考虑上面的归一化因子，则在状态 $[\lambda]=[\lambda_1,\cdots,\lambda_n]$ 里的量 $A$ 的矩阵成分为

$$(\varphi''_{ik},A\psi'_{jk})=\delta_{kl}\frac{1}{\sqrt{h_1h_2}}\sum_P \bar{v}''_{ij}(P)A(P),\qquad(20.8)$$

$(h_1,h_2$ 是 $H_1,H_2$ 的阶数$)$。

这里 $V''(P)=[v''_{ij}(P)]$ 是表象矩阵 $\mathscr{D}[\lambda]$ 的一部分，$i$ 行是把 $H_1$ 用 1 表示的基底的长方矩阵，$j$ 列是把 $H_2$ 用 1 表示的基底的长方矩阵。对于 $T_1\in H_1$，$T_2\in H_2$，有

$$(T_1\varphi,APT_2\psi)=(\varphi,T_1^{-1}PT_2A\psi)$$

$$=A(T_1^{-1}PT_2)=A(P),\qquad(20.9)$$

故对分别属于两侧剩余类 $H_1PH_2$ 的元素 $A(P)$ 的值是相等的。于是若令属于 $H_1PH_2$ 的元素总数为 $N_p$，则 $A$ 的矩阵可写为

$$\frac{1}{\sqrt{h_1h_2}}\sum N_PV''(P)A(P).\qquad(20.10)$$

这里是取关于 $P$ 的和，是把从 $H_1PH_2$ 里取出的每个代表元素 $P$ 一个一个相加的。$N_P$ 等于由 $(P^{-1}H_1P)\cap H_2$ 元素构成的群的阶

数。[若 $T_1\in H_1$, $T_2\in H_2$, 而且 $\{T_1PT_2\}$ 的全体元素完全相异时,則 $N_P=h_1h_2$;如果 $P$ 与 $T_1$ 是可对易的,則 $T_1PT_2=PT_1T_2$,这样的相异元素总数不超过 $h_1$ 个(因为假定 $p\geqslant q$, 所以 $h_1\geqslant h_1$)]。

## §21 量子力学中的对称問題

依 Pauli 原理, $n$ 个电子或核子的集团的状态,可以用 Hilbert 空間 $H^n$ 里的反对称矢量来表示。而 $H=F\times U$ [对于电子, $U$ 表示自旋空間(2維么正),对于核子, $U$ 表示电荷自旋及通常自旋的4維空間],令 $H^n$ 的基底为 $F^n\times U^n$, 則上述状态可以在 $F^n$ 及 $U^n$ 里以适当对称化的矢量的积来表示。Pauli 原理所要求的是对于粒子的全体置換的反对称性。由此,若令作用于空間坐标 $x_s$ 的置換是 $P_x$,作用于自旋坐标 $\sigma_s$ 的置換为 $P_\sigma$, 則 $P_xP_\sigma=\delta(P_x)$。这說明了 $\{P_x\}$ 的表象 $\mathscr{D}[\lambda']$ 和 $\{P_\sigma\}$ 的表象 $\mathscr{D}[\lambda]$ 是对偶的, $[\lambda']=[\lambda]^*$。

把1体近似应用于原子、原子核問題时,1体的状态矢量的空間部分,是3維回轉群的不可約表象基底 $\phi(\alpha jm)$。这里 $\alpha$ 是区別屬于同一 $D_j$ 基底出現的次数之記号。所以

$$\psi=\phi_1(\alpha_1j_1m_1)\phi_2(\alpha_2j_2m_2)\cdots\phi_n(\alpha_nj_nm_n), \qquad (21.1)$$

如果在 $(\alpha_sj_s)$ 里沒有相等的,則先作出为 $(2j_1+1)\times\cdots\times(2j_n+1)$ 个基底的綫性組合并作出由

$$D_{j_1}\times D_{j_2}\times\cdots\times D_{j_n}=\sum g_JD_J \qquad (21.2)$$

所决定的 $D_J$ 基底;再把这个基底对称化,用 $J$ 和 $[\lambda]$ 就可以作出固定状态的基底。但是若全体的 $\alpha_s\,j_s$ 都相等, 即用量子力学中的記号可写为 $j^n$ 时,在(21.1)里出現相等的 $\phi(\alpha jm)$ 的数如果多于 $\lambda_1$, 具有这样对称性的基底是作不出来的, 所以这样的状态就不能出現。(例如从 $f(x_1)g(x_2)$ 可作出对称、反对称函数 $f(x_1)g(x_2)\pm f(x_2)g(x_1)$,但是 $f(x_1)f(x_2)$ 自身是对称的,所以不能从它作出反对称函数。)因此,如在(21.1)里某个 $D_J$ 被禁止,而 $g_J$ 一般也減

少。为明了这个問題，可考虑由 $D_j$ 的基底构成的張量表象基底[1]

$$\phi(m_1)\phi(m_2)\cdots\phi(m_n) \quad [j\geqslant m_k\geqslant -j]$$

的对称化問題。但因属于 $D_j$ 的变换是 $(2j+1)$ 阶的特殊的么正变换，所以要把問題推广，首先要考虑么正空間（$U$ 空間）張量的对称性。对于自旋函数成問題的是二阶或四阶特殊的么正变换，这問題也可应用同样的方法来解。

## §22 么正变换

$m$ 阶么正群 $U(m)$ 可以看作 $m$ 阶么正矩陣 $U=(u_{ik})$ 的集合。$u_{ik}$ 一般是复数，在这些复数之間有"么正条件"成立：

$$\overline{U}^T U = E \quad (m \text{ 阶单位矩陣})。 \tag{22.1}$$

因此独立的参数有 $m^2$ 个。满足

$$\det(U)=1 \tag{22.2}$$

条件的 $U$ 的集合构成特殊么正群 $SU(m)$。

么正矩陣 $U$ 能被么正变换 $S$ 对角綫化：

$$S^{-1}US=\mathrm{diag}(\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_m). \tag{22.3}$$

这里

$$|\varepsilon_j|=1 \text{ 或 } \varepsilon_j=e^{i\omega_j} \quad (\omega_j \text{ 是实数})\ (j=1,2,\cdots,m). \tag{22.4}$$

所以"群 $U(m)$ 的类可以由

$$\varepsilon(\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_m) \text{ 或 } \omega(\omega_1,\cdots,\omega_m) \tag{22.5}$$

賦予特征"。而且在(22.3)里用么正变换可以把 $\varepsilon_1,\cdots,\varepsilon_m$ 或 $\omega_1,\cdots,\omega_m$ 任意調换，与順序无关。

对于 $SU(m)$，需要：

$$\varepsilon_1\varepsilon_2\cdots\varepsilon_m=1 \text{ 或 } \omega_1+\cdots+\omega_m=0 \tag{22.6}$$ [2]

关系成立。所以独立的 $\varepsilon$ 或 $\omega$ 的数是 $m-1$。

---

[1] 因为 $j$ 是固定的，所以省略。

[2] 此处似乎应改为 $\omega_1+\cdots+\omega_m=2k\pi$（$k$ 为整数）較恰当些。——譯者注

因为么正群是連續的，所以可以由无穷小变换生成。例如 $SU(4)$的无穷小变换集合构成15維矢量空間，令它的基底与 $\sum i\gamma_A$ 相乘可成15个 Dirac 矩陣，这里 $\gamma_A$ 是 Spur 0 的四阶 Hermite 矩陣。在这15个矩陣里可对易的有3个，可按下列对角綫形式来取(只記对角綫成分)：

$$(1\ 1-1-1),\quad (1-1\ 1-1),\quad (1-1-1\ 1). \qquad (22.7)$$

## §23 么正群 $U(m)$ 的不可約表象

$m$ 維空間的矢量 $x(x_1, \cdots, x_m)$ 的綫性变换

$$x'_i = \sum_j u_{ij} x_j$$

及 $n$ 个矢量 $x, y, \cdots, w$ 的积

$$x_{i_1} y_{i_2} \cdots w_{i_n} \quad (i_1, i_2, \cdots, i_m = 1, 2, \cdots, m)$$

具有同样的变换規則，而且具有 $m^n$ 个分量 $T(i_1, i_2, \cdots, i_n)$ 的量 $T$ 叫做 $m$ 維空間中的 $n$ 阶張量。用群論的語言来說，$T$ 就是依照属于 $U(m)$ 的 $n$ 个張量的积 $U\times U\times\cdots\times U=(U)^n$ 变换而变换的量。于是可以証明：$U(m)$ 的表象，除去对 $n=0, 1, \cdots$ 的張量表象以外沒有其他方法了。在 $n$ 阶張量里，包含着对称張量、反对称張量的不可約成分，这些成分分别与一行一列的 Young 氏图对应，由此可以想到一般的不可約成分能由 Young 氏图賦予特征。实际上，“$(U)^n$ 的不可約成分，由分割 $[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m]$ 决定。”但是当 $n\geqslant m$ 时，Young 氏图的行数大于 $m$ 的除外。例如当 $n=3$, $m=4$ 时，$[1^4]$ 的表現不存在。(在 $i_1 i_2 i_3 i_4$ 里至少有两个相等的，經反对称化后必为 0。) 现在把用分割 $[\lambda]$ 表示的 $U(m)$ 的不可約表象記为 $R(\lambda)$，則 $R(\lambda)$ 的特征标可由

$$\chi_\lambda(\varepsilon) = \frac{|\varepsilon^{\mu_1}, \varepsilon^{\mu_2}, \cdots, \varepsilon^{\mu_m}|}{|\varepsilon^{m-1}, \cdots, \varepsilon, 1|} \qquad (23.1)$$

来給出❶。这里分子是順次以 $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_m$ 代入 $\varepsilon$ 为行的行列式，分母是 Vandermonde 行列式，即 $(\varepsilon_1, \cdots, \varepsilon_m)$ 差的乘积。$\mu_j$ 是由 (15.7) 所定义的数：

$$\mu_1 = \lambda_1 + m - 1, \quad \mu_2 = \lambda_2 + m - 2, \cdots,$$
$$\mu_{m-1} = \lambda_{m-1} + 1, \quad \mu_m = \lambda_m$$
$$(\mu_1 > \mu_2 > \cdots > \mu_m \geqslant 0). \tag{23.2}$$

$R(\lambda)$ 的阶数可以用

$$F_\lambda = \frac{D(\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_m)}{D(m-1, \cdots, 2, 1)} \tag{23.3}$$

給出。(23.1)包含在对称群的不可約表象 $\mathscr{D}(\lambda)$ 的特征标 $\chi_\lambda(k)$ 和

$$\chi_\lambda(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_m) = \sum_{(k)} \frac{\chi_\lambda(k)\sigma_1^{k_1}\sigma_2^{k_2}\cdots}{1^{k_1}2^{k_2}\cdots k_1!k_2!\cdots}$$

的关系里。这里

$$\sigma_j = \varepsilon_1^j + \varepsilon_2^j + \cdots + \varepsilon_m^j \quad (k) = (k_1, k_2, \cdots).$$

关于(23.2)的計算，可由以下二定理来加以簡化：

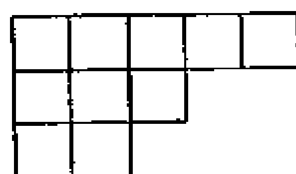
(I) 在 (23.1) 中如果 $\mu_m = \lambda_m > 0$，就可以从分子的第一行把 $\varepsilon_1^{\lambda_m}, \cdots$，从第 $m$ 行把 $\varepsilon_m^{\lambda_m}$ 当作因子提出，于是分子就成为下面的形式：

$$(\varepsilon_1\varepsilon_2\cdots\varepsilon_m)^{\lambda_m} \left| \varepsilon^{\mu_1-\mu_m}, \varepsilon^{\mu_2-\mu_m}, \cdots, \varepsilon^{\mu_{m-1}-\mu_m}, 1 \right|$$

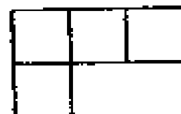
如果以下专考虑 $SU(m)$，則由 $\varepsilon_1\cdots\varepsilon_m = 1$ 可得

$$\chi_\lambda(\varepsilon) = \chi_{\lambda'}(\varepsilon), \ [\chi'] = [\lambda_1 - \lambda_m, \cdots, \lambda_{m-1} - \lambda_m, 0]. \tag{23.4}$$

如果把上面的結果用 Young 氏图来說明 [以 $SU(3)$ 为例]，則为



$[\lambda] = [5, 3, 2]$



$[\lambda'] = [31]$

❶ $\chi_\lambda(P)$ 是 $\mathscr{D}[\lambda]$ 的特征标，$\chi_\lambda(\varepsilon)$ 是 $R[\lambda]$ 的特征标，后面的 $\chi_j$ 是三阶回轉群表象 $D_j$ 的特征标，注意不要混淆。

所以，例如当 $\lambda_1=\cdots=\lambda_m(>0)$ 时，$\chi(k)=1$ (恒等表象)。

(II) 如果从(23.1)的分子各行提出 $\varepsilon_1^{\mu_1},\cdots,\varepsilon_m^{\mu_1}$，则分子成为

$$(\varepsilon_1\cdots\varepsilon_m)^{\mu_1}|1,\ \varepsilon^{\mu_2-\mu_1},\ \cdots,\ \varepsilon^{\mu_m-\mu_1}|\quad(\mu_m=0),$$

同样分母为

$$(\varepsilon_1\cdots\varepsilon_m)^{m-1}|1,\ \varepsilon^{-1},\ \cdots,\ \varepsilon^{-m+1}|.$$

利用 $\varepsilon_1\cdots\varepsilon_m=1$ 的性质，把分子、分母的矩陣置换成相同的，而令 $\varepsilon_r^{-1}=\delta_r$，则

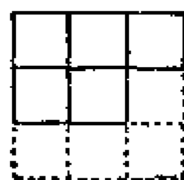
$$\chi_\lambda(\delta)=\frac{|\delta^{\mu_1-\mu_m},\delta^{\mu_1-\mu_{m-1}},\cdots,\delta^{\mu_1-\mu_2},1|}{|\delta^{m-1},\delta^{m-2},\cdots,\delta,1|},$$

即

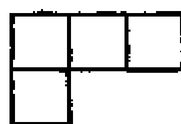
$$\chi_\lambda(\varepsilon)=\chi_{\lambda''}(\varepsilon^{-1}),\tag{23.5}$$

这里 $[\lambda'']=[\lambda_1,\ \lambda_1-\lambda_{m-1},\ \cdots,\ \lambda_1-\lambda_2]$ ❶。

例 $SU(3)$

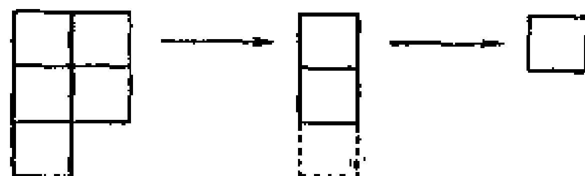


$[\lambda]=[32]$



$\lambda''=[31]$

把 (I)，(II) 合并 ($m=3$ 时)



作为(23.1)的应用，例如来解下面的問題。如果把$SU(2j+1)$ ($j=0,1/2,1,3/2,\cdots$) 限定于回轉群的 $2j+1$ 阶的特殊么正表象 $D_j$ 的变换里 ($D_j$ 是 $SU(2j+1)$ 的子群)，则

$$\varepsilon_1=\varepsilon^j,\ \varepsilon_2=\varepsilon^{j-1},\ \cdots,\ \varepsilon_{2j+1}=\varepsilon^{-j}.\tag{23.6}$$

❶ 以后可以知道，这相当于以 $n$ 个穴代替開充 $-n$ 个的問題。

如果以上面的結果代入(23.1)，而写成回轉群单純特征标 $\chi_J(\varepsilon)$ 的和的形式（$n$ 个等同粒子处于相同 $j$ 状态），則在 $j^n$ 配置中可能的 $J$ 的值和状态的重复度 $\eta_J$ 都可从下式中求得：

$$\chi_\lambda(\varepsilon^j, \varepsilon^{j-1}, \cdots, \varepsilon^{-j}) = \sum \eta_J \chi_J(\varepsilon). \tag{23.7}$$

（在量子力学里，通常以 $\varepsilon = e^{-i\omega/2}$ 中的旋轉角 $\omega$ 来代替 $\varepsilon$。）在这种情况下，由于 $\{\varepsilon_v\}$ 和 $\{\varepsilon_v^{-1}\}$ 是一致的，因而根据(II)知道 $\chi_{[\lambda]}(\varepsilon) = \chi_{[\lambda'']}(\varepsilon)$。

**例** $p^2(j=1, m=3, n=2)$。对于 $[\lambda]=[2]$，$[\lambda]=[1^2]$，(23.1)的分子分别为

$$\begin{vmatrix} \varepsilon^4 & \varepsilon & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ \varepsilon^{-4} & \varepsilon^{-1} & 1 \end{vmatrix} = D(\varepsilon, 1, \varepsilon^{-1})(\varepsilon^3 - \varepsilon^{-3} + \varepsilon - \varepsilon^{-1}),$$

$$\begin{vmatrix} \varepsilon^3 & \varepsilon^2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ \varepsilon^{-3} & \varepsilon^{-2} & 1 \end{vmatrix} = D(\varepsilon, 1, \varepsilon^{-1})(\varepsilon^2 - \varepsilon^{-2}).$$

由此可知对于[2]，$J=2, 0$，对于$[1^2]$，$J=1$。由(II)知$[1^2]$与[1]有相同的特征标，所以从特征标将后者求出比較方便。关于 $p^4$，利用(II)可以立刻知道[22]等于[2]，$\therefore\ J=2, 0$，[31]等于$[1^2]$，$\therefore\ J=1$。

当 $j$, $n$ 較大时，这个計算就有些复杂，这时利用下面的遞推方式比較方便。[根据(I)最初就令 $\lambda_{2j+1}=0$。]

以 $\varepsilon^{(\mu_1+\cdots+\mu_{2j})j}$ 乘关于 $\lambda(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_{2j+1}(=0))$，$\varepsilon(\varepsilon^0, \varepsilon^{j-1}, \cdots, \varepsilon^{-j})$ 特征标式的分子，而以行列式的"第 $s$ 列"代表該行列式，就可写为

$$[\varepsilon^{2j\mu_s}, \varepsilon^{(2j-1)\mu_s}, \cdots, 1] \quad (2j+1\text{阶}). \tag{23.8}$$

而在上面的行列式里如果从第1行减第2行，…，从第 $2j$ 行减第 $2j+1$ 行則成

$$\prod_{s=1}^{j}(\varepsilon^{\mu_s}-1)[\varepsilon^{(2j-1)\mu_s}, \cdots, \varepsilon^{\mu_s}, 1] \quad (2j\text{ 阶})$$

的形式。$\mu_{2j}>0$ 时，从各行提出 $\varepsilon^{(2j-1)\mu_{2j}}, \cdots, \varepsilon^{\mu_{2j}}, 1$ 的因子，而令

$$\mu'_1 = \mu_1 - \mu_{2j}, \cdots, \mu'_{2j-1} = \mu_{2j-1} - \mu_{2j}, \tag{23.9}$$

則可将上式写为

$$\varepsilon^{j(2j-1)\mu_{2j}}\prod_{i=1}^{2j}(\varepsilon^{\mu_i}-1)[\varepsilon^{(2j-1)\mu_i},\ \cdots,\ \varepsilon^{\mu_i},1], \qquad (23.10)$$

这就归結于以 $(2j-1)/2$ 代替 (23.8) 中 $j$ 的結果。(令 $\mu_1=2j$，$\mu_2=2j-1$，$\cdots$，$\mu_{2j}=1$，可以用同样方法来計算分母。)

**例**　$j=2$，$n=3$，$\lambda=[2,1]$　($d^3$ 的 2 重項)。

$$\chi_\lambda(\varepsilon)=\varepsilon^{-15}(\varepsilon^6-1)(\varepsilon^4-1)(\varepsilon^2-1)(\varepsilon-1)\cdot(\varepsilon^5-1)(\varepsilon^3-1)(\varepsilon-1)$$
$$\cdot(\varepsilon^4-1)(\varepsilon^2-1)\cdot(\varepsilon^2-1)\div\varepsilon^{-10}(\varepsilon^4-1)(\varepsilon^3-1)^2(\varepsilon^2-1)^3(\varepsilon-1)^4$$
$$=\varepsilon^5+2\varepsilon^4+3\varepsilon^3+5\varepsilon^2+6\varepsilon+7+\cdots,$$

从而得到 $J=5$，4，3，2，1，0，利用

$$\chi(\varepsilon)=\frac{(\varepsilon^3+1)(\varepsilon^5-1)(\varepsilon^3+\varepsilon^2+\varepsilon+1)}{\varepsilon^5(\varepsilon-1)}$$
$$=\frac{1}{\varepsilon-1}[(\varepsilon^6-\varepsilon^{-5})+(\varepsilon^5-\varepsilon^{-4})+(\varepsilon^4-\varepsilon^{-3})+2(\varepsilon^3-\varepsilon^{-2})+(\varepsilon^2-\varepsilon^{-1})]$$

的記法，也可由 $\chi_J(\varepsilon)=(\varepsilon^{J+1}-\varepsilon^{-J})/(\varepsilon-1)$ 求得 $J$ 的值和它的重复度。关于 $j$，$n$ 的大多数数值的計算，用順次計算法比較方便，但不如使用后面所敘述的关于对称群的分歧律来得簡单。

## §24　对于原子及 *jj* 耦合核的应用

按照三維回轉群 $R(3)$ 不可約表象 $D_{\frac{1}{2}}$ 而变换的量，可以用来作为自旋的定义。而 2 价表象 $D_{\frac{1}{2}}$ 和 2 阶特殊么正群 $SU(2)$ 在本质上是相同的，所以采用后者，因此前节的結果可以照旧使用。令繞 $z$ 軸的无穷小旋轉为 $iS_z$，则可以用属于 $S_z$（自旋角动量的 $z$ 分量）的本征值 $1/2$，$-1/2$ 的本征矢量 $\theta(1)$，$\theta(2)$ 作为 2 阶么正空間 $U_2$ 的基底。常常以 $\alpha$，$\beta$ 来表示这些基底。把

$$\theta(1,\ 2,\ \cdots,\ n)=\theta_1(i_1)\theta_2(i_2)\cdots\theta_n(i_n) \qquad (24.1)$$

对称化后就成为 $n$ 粒子自旋状态的基底。但是 1 体函数 $\theta_r(i_r)$ 还用以前的写法，$r$ 是 1，2，$\cdots$，$n$；$i_1$，$i_2$，$\cdots$，$i_n$ 表示 1 或 2（而常用的却是 $1/2$，$-1/2$）。

因为 (24.1) 是 $U_2(m-2)$ 的 $n$ 阶張量，所以它的对称性由 $[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2]$ $(\lambda_1+\lambda_2=n, \lambda_1\geqslant\lambda_2)$ 来决定。根据(1)知道，它的表象特征标和 $[\lambda']=[\lambda_1-\lambda_2, 0]$ 的特征标相等，所以

$$\chi_{[\lambda]}(\varepsilon)=\frac{\varepsilon^{\lambda_1-\lambda_2+1}-\varepsilon^{-(\lambda_1-\lambda_2)-1}}{\varepsilon-\varepsilon^{-1}}=\chi_{\frac{\lambda_1-\lambda_2}{2}}(\varepsilon). \tag{24.2}$$

也就是等于回轉群 $R(3)$ 的不可約表象 $D_S(S=(\lambda_1-\lambda_2)/2)$. 这与作出回轉群表象的积

$$D_{\frac{1}{2}}\times D_{\frac{1}{2}}\times\cdots\times D_{\frac{1}{2}}=\sum g_S D_S$$

是一样的。但是当 $g_S>1$ 时，把属于同一 $S$ 的 $g_S$ 个状态的基底按前面的系图顺序来取，由图 24.1 的分歧律知道，自旋 $\boldsymbol{S}$ 的合成可以按

$$s_1, s_2, S_{12}; s_3, S_{123}; \cdots; s_{n-1}, S_{12\cdots(n-1)}; s_n, S$$

方式进行。

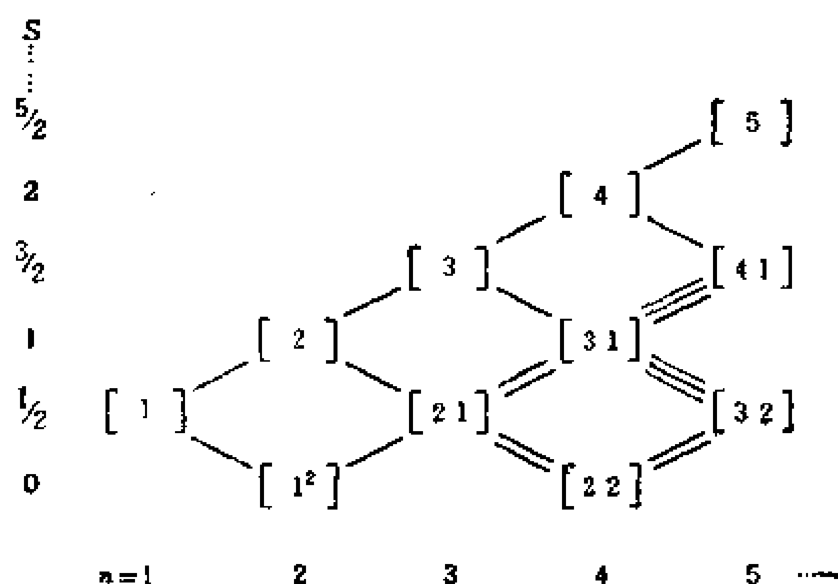



图 24.1

在原子問題中，$n$ 个电子的关于空間坐标的对称性和这个表象是对偶的，所以 $[\lambda]=[2^{\lambda_2}1^{\lambda_1-\lambda_2}]$. 如果以 $n$ 与 $S=(\lambda_1-\lambda_2)/2$ 代替 $\lambda_1, \lambda_2$，則对称性可由 $[2^{\frac{n}{2}-S}, 1^{2S}]$ 給出。在物理学中以多重度

$2S+1$ 表示对称性 $[\lambda]$。$S$ 的最大值 $n/2$ 对应于 $[1]$，即对应于反对称状态。

用 $jj$ 耦合处理原子核問題时，对一体状态取其 $\boldsymbol{l}+\boldsymbol{s}=\boldsymbol{j}$ ($\boldsymbol{l}$ 是軌道角动量) 的本征状态 $\phi(jm)$。換句話說，它表示 $H'=F\times U_S$ ($U_S$ 是自旋空間)的矢量。这样就可以令 $H=(F\times U_S)\times U_T=H'\times U_T$ ($U_T$ 是电荷自旋空間)。从而 $H=H'^n\times U_T^n$，若以 $T$ 代替 $S$ (因为电荷自旋和自旋一样也具有 $SU(2)$ 的变換性)，則在 $H'^n$ 中的对称性和上面的場合完全一样。

对称群对于 $j^n$ 配置特别有用，所以现在就以 $j$ 为 0 或自然数(原子)半整数($jj$ 耦合的原子核)来处理这个問題。首先要考虑的是在由 $j^n$ 配置生成的$[\lambda]$状态里有什么样的 $J$ 状态，以及各有几个出现。在前面曾叙述过用特征标解决这样的問題的一般求法，对于 $n$ 的大多数的值，用下面的方法比較便利。

关于 $j^2$：直接作出对称$[2]$及反对称$[1^2]$的基底，可得到下面的結果[参照(10.9)]：

$$\left.\begin{aligned}&[2]:\ J=2j,\ 2j-2,\ \cdots,\ 0\,(j\text{ 为整数})\\&\qquad\qquad\text{或 }1\ (j\text{ 为半整数}),\\&[1^2]:\ J=2j-1,\ 2j-3,\ \cdots,\ 1\,(j\text{ 为整数})\\&\qquad\qquad\text{或 }0\ (j\text{ 为半整数}).\end{aligned}\right\}\qquad(24.3)$$

每个的簡并度都是 1.

根据对称群的分歧律，$\mathscr{D}[2^p1^q]$ 包含 $S_{n-1}$ 的 $\mathscr{D}[2^{p-1}1^{q+1}]$ 及 $\mathscr{D}[2^p1^{q-1}]$。反过来說，$S_{n-1}$ 的 $\mathscr{D}[2^\alpha1^\beta]$ 被 $S_n$ 的 $\mathscr{D}[32^{\alpha-1}1^\beta]$，$\mathscr{D}[2^{\alpha+1}1^{\beta-1}]$ 及 $\mathscr{D}[2^\alpha1^{\beta+1}]$所包含(参照分歧律)。由此可得

$$R[1]\times R[2^\alpha1^\beta]=R[32^{\alpha-1}1^\beta]+R[2^{\alpha+1}1^{\beta-1}]+R[2^\alpha1^{\beta+1}].\qquad(24.4)$$

若把 $R[2^\alpha1^\beta]$按回轉群簡約的結果用

$$\sum g_{J'}D_{J'}$$

来表示，則

$$R[1]\times R[2^{\alpha}1^{\beta}]=D_j\times\sum g_{J'}D_{J'}=\sum g_J D_J. \qquad (24.5)$$

如下例所示，从(24.4)，(24.5)可以求得包含于 $R[2^p1^q]=\sum h_J D_J$ 的 $D_J$ 及其简并度 $h_J$.

**例 1** $d^3(j=2)$（参照前节的例）。（为了簡单用[λ]表示 $R[\lambda]$.）

$$[1]=D_2,\ [1^2]=D_1+D_3,$$

$$[1]\times[1^2]=[21]+[1^3]=[21]+[1^2]\quad (m=5)$$

$$=2D_3+2D_2+2D_1+D_5+D_4.$$

由此得
$$[21]=D_5+D_4+D_3+2D_2+D_1.$$

**例 2** $(3/2)^3(j=3/2)$.

$$[1]=D_{3/2},\ [2]=D_1+D_3,\ [1^2]=D_0+D_2.$$

$$[1]\times[1^2]=[21]+[1^3]=[21]+[1]\quad (m=4)$$

$$=D_{3/2}\times(D_0+D_2)=D_{1/2}+2D_{3/2}+D_{5/2}+D_{7/2}.$$

由此得
$$[21]=D_{7/2}+D_{5/2}+D_{3/2}+D_{1/2}. \qquad (24.6)$$

在这种場合 $R[\lambda]$ 的阶数(23.3)

$$F_\lambda=\prod_{i>k=1}^{2j+1}\left(\frac{\lambda_i-\lambda_k+i-k}{k-i}\right)$$

等于

$$\sum_J h_J(2J+1)\quad (\text{关于在 } R[\lambda] \text{ 中出现的 } J \text{ 求和}),$$

它对于驗算是很有用处的。只用(24.4)，(24.5)不能决定 $J$ 及 $h_J$ 时就对 $S_{n_1}\times S_{n-n_1}$ 作同样的計算。

**例** $(3/2)^4$. 根据表 20.2 得

$$[1^2]\times[1^2]=[22]+[21^2]+[1^4]=[22]+[21^2]+[0],$$

$$(\text{因为 } m=4,\ [1^4]=[0]),$$

$$[2]\times[1^2]=[31]+[21^2],$$

又从 $[1]\times[21]=[31]+[22]+[21]^2$ 得

$$[22],\ J=0,\ 2,\ 2,\ 4,$$

$$[21^2],\ J=1,\ 2,\ 3.$$

由 § 23(II) 可知 $j^5, \cdots, j^8$ 的 $[2^{\alpha}1^{\beta}]$ 和 $j^4, \cdots, j^{\nu}$ 的 $[2^{l-(\alpha+\beta)}, 1^{\beta}]$ 相同，故知关于 $(3/2)^3$ 的所有可能的 $([\lambda], J)$ 都求得了。

关于把 $R[\mu]\times R[\nu]=\sum_{\lambda}R[\lambda]$ 对 $S_{n_1}\times S_{n-n_1}$ 簡約后出現的 $[\lambda]$ 的种类有下面的一般性定理。現在只叙述結果，而省去其証明。对 $[\mu]$ 的 Young 氏图添加滿足 $n_2=\nu_1+\nu_2+\cdots(n_2=n-n_1)$ 条件的方格，就可以得到 $[\lambda]$ 的 Young 氏图。对 $\sum\nu_r=n_2$ 个方格中的 $\nu_1$ 个加 $\alpha$，$\nu_2$ 个加 $\beta$，$\nu_3$ 个加 $\gamma\cdots\cdots$ 的記号，則可得下面的結果：

(1) 有相同記号(例如 $\beta$)的两个以上的方格不排在同一列內。

(2) 把加上的記号从上面的行开始自右向左讀过去可得 $\alpha^{\nu_1}\beta^{\nu_2}\gamma^{\nu_3}\cdots$ 的格子排列(lattice permutation)。这里所謂 $\alpha^{\nu_1}\beta^{\nu_2}\gamma^{\nu_3}\cdots$ 的格子排列就是 $n_2$ 个記号 $\underbrace{\alpha\cdots\alpha}_{\nu_1}\underbrace{\beta\cdots\beta}_{\nu_2}\underbrace{\gamma\cdots\gamma}_{\nu_3}\cdots$ 的置换，而包含于最初的 $r$ 項 $(r=1,2,\cdots,n_2)$ 的 $\alpha$ 的数 $\geqslant\beta$ 的数 $\geqslant\gamma$ 的数 $\geqslant\cdots$。

例如，因为 $\alpha^2\beta$ 的格子排列是 $\alpha^2\beta$，$\alpha\beta\alpha$，若令 $[\mu]=[1^3]$，則 $[1^3]\times[2^21]=\sum[\lambda]$ 可能的 $\lambda$ 的 Young 氏图，可以用图 24.2 表示，即

$$[1^3]\times[2^21]=[3\,2\,1]+[3\,1^3]+[2^2\,1^2]+2[2\,1^4].$$

在現在的場合，我們不希望有 3 列以上的 Young 氏图出現（参照图 24.3），所以 $[1^2]\times[1^p]=[2^21^{p-2}]+[21^p]+[1^{p+2}]$ 的图是有用的(和 $[1^p]=[1^{2f+1-p}]$ 一起)。

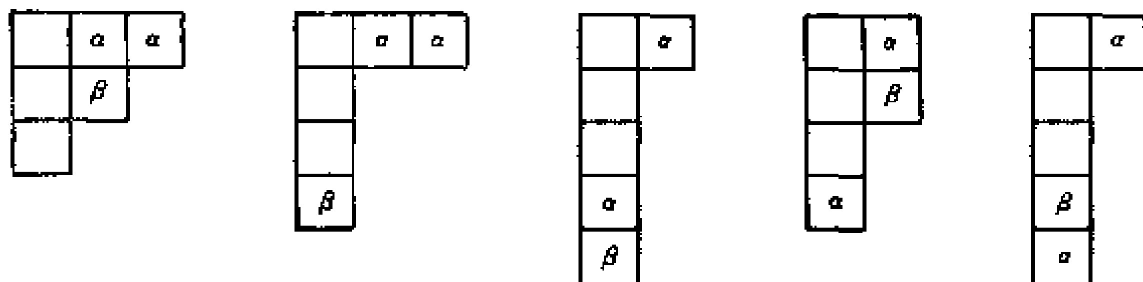


图　24.2

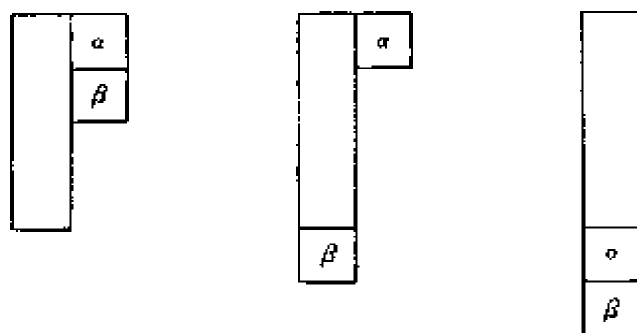


图 24.8

## §25 对 $LS$ 耦合核的应用(超多重度)

設 $F\times U_4$ 表示核子状态的 Hilbert 空間，而利用 $F^n\times(U_4)^n$ 里基底时，空間坐标的对称性可当作 $(SU(4))^n$ 不可約表象 $[\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4]$ 的对偶来决定。Wigner 把这样的状态称为超多重态 (supermultiplet state)。

把 $U_4$ 的基底按照 $SU(2)$ 变換而得来的二組基底，也就是表示通常自旋和电荷自旋的基底 $u_1$, $u_2$; $v_1$, $v_2$ 的积:

$$\phi_1=u_1v_1,\ \phi_2=u_1v_2,\ \phi_3=u_2v_1,\ \phi_4=u_2v_2, \tag{25.1}$$

能用来表示属于 $s_z$ 及 $\tau_\zeta$ 的本征值

$$\frac{1}{2}(1,\ 1,\ -1,\ -1),\ \frac{1}{2}(1,-1,1,-1) \tag{25.2}$$

的本征状态。同时这些状态也是和 $s_z$, $\tau_\zeta$ 可对易的 $\mu_\zeta=s_z\tau_\zeta$ 的本征值为 $\frac{1}{2}(1,\ -1,\ -1,\ 1)$ 的本征状态。

$n$ 个核子系統的超多重态可以用 $[\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4]$ $(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3+\lambda_4=n)$ 来决定。而 Wigner 用三个数

$$S=\frac{1}{2}(\lambda_1+\lambda_2-\lambda_3-\lambda_4),$$

$$T=\frac{1}{2}(\lambda_1-\lambda_2+\lambda_3-\lambda_4),$$

$$Y=\frac{1}{2}(\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3+\lambda_4)$$

来指定这种状态。

当 $SU(4)$ 限定于 $SU(2)\times SU'(2)$ 时，在 $SU(4)^n$ 表象 $R[\lambda]$ 里含有多少 $D_S\times D'_T$，也就是在 $[\lambda]$ 里包含有电荷自旋多重度 (charge-spin multiplet) $(2T+1,\ 2S+1)$ 的什么样的部分，可以用下面的計算求出。首先关于表 25.1 的簡单結果是很容易知道的。(用以 $\chi_T(\alpha)\chi_S(\beta)$ 表示特征标 $\chi_\lambda(e)$ 的方法也能求 $e=(\alpha\beta,\ \alpha\beta^{-1},\ \alpha^{-1}\beta,\ \alpha^{-1}\beta^{-1})$.)

表 25.1

| $[\lambda]$ | $(2T+1, 2S+1)$ |
|---|---|
| $[0]=[1^4]$ | (11) |
| $[1]$ | (22) |
| $[2]$ | (11), (33) |
| $[1^2]$ | (13), (31) |

对于 $n=3$，利用角动量的合成及 $[1]\times[\mu]=\sum[\lambda]$，

| $(2T+1, 2S+1)$ | (22) | (24) | (42) | (44) | |
|---|---|---|---|---|---|
| $[1](22)\times[2](11)$ | 1 | 0 | 0 | 0 | $[3]+[21]$ |
| $\times[2](33)$ | 1 | 1 | 1 | 1 | |
| $\times[1^2](13)$ | 1 | 1 | 0 | 0 | $[21]+[1^3]=[21]+[1]$ |
| $\times[1^2](31)$ | 1 | 0 | 1 | 0 | |

由于[1]是(22)，所以[21]是(22)+(24)+(42)，由此可知[3]是(22)+(44)．这样的方法可以反复使用。Jahn 一直計算到 $n=10$ (Proc. Roy. Soc., A201(1950), 516)。

在 $l^n$ 状态，对偶于 $[\lambda]$ 的空間函数的对称性 $[\lambda]^*$ 的状态中可能的 $L$ 值及其簡并度，可以用和前节相类似的方法来得之。

**例** 設 $p^n[2]=2+0$, $[1^2]=1$ 为已知❶。

| $L$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | $\Sigma[\lambda]$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $[1]\times[1^2]$ | 1 | 1 | 1 | | | $[21]+[0]$ |
| $\times[2]$ | | 2 | 1 | 1 | | $[3]+[21]$ |
| $\times[21]$ | 1 | 2 | 2 | 1 | | $[31]+[2]+[1]$ |
| $\times[3]$ | 1 | 1 | 2 | 1 | 1 | $[4]+[31]$ |
| $\times[31]$ | 1 | 2 | 3 | 2 | 1 | $[41]+[31]+[2]$ |
| $\times[32]$ | 1 | 2 | 3 | 2 | 1 | $[42]+[3]+[21]$ |

由此可順次求得 $L$ 的对每个$[\lambda]$的可能的值如下：

| $L$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|---|---|---|---|---|
| $[0]$ | 1 | | | | |
| $[1]$ | | 1 | | | |
| $[2]$ | 1 | | 1 | | |
| $[3]$ | | 1 | | 1 | |
| $[21]$ | | 1 | 1 | | |
| $[4]$ | 1 | | 1 | | 1 |
| $[31]$ | | 1 | 1 | 1 | |
| $[41]$ | | 1 | 1 | 1 | 1 |
| $[42]$ | 1 | | 2 | 1 | 1 |

直接把 $U(2j+1)$ 的表象 $R[\lambda]$ 当作 $R(3)$ 的表象来簡約倒不如先当作 $U(2j+1)$ 的子群 $R(2j+1)$（$j$ 为整数时）或 $S_p(2j+1)$（$j$ 为半整数时）❷的表象来簡約为好，因为它能把基底更明确的标志出来。关于这个問題，請参考 Jahn（前述）及 Flowers 的論文（Proc. Roy. Soc., A212 (1952), 248）。

## §26 对称状态中的能量的計算

由 $j^n$ 配置生成的（$[\lambda]$, $J$）状态的可能种类及其简并度，正如前节所述，能用比較簡单的方法求得。求这样状态里的物理量，例如能量 $H$ 的期望值，一般地說，需要把（$[\lambda]$, $J$）状态的基底具体

❶ 这里用超多重度的$[\lambda]$表示状态。

❷ $R$ 是回轉群，$S_p$ 是斜交群。参照岩堀著 Lie 群論，§12。

地作出，所以比較麻煩。

这些基底可以从1体近似基底

$$\phi_1(m_1)\phi_2(m_2)\cdots\phi_n(m_n)=\phi(m_1\cdots m_n) \qquad (26.1)$$

用么正变换作成。因为空間的旋轉 $r$ 和粒子的置換 $P$ 是可换的，所以对旋轉 $r$ 能选取按照同一 $D_J$ 变换的 $f_\lambda^2$ 組基底，对置換 $P$ 能选取依照同一 $R[\lambda]$ 变换的 $2J+1$ 組基底，于是总共能选取 $f_\lambda^2(2J+1)$ 組基底，从而当 $j_1j_2\cdots j_n$ 配置的1体近似函数 $\phi(\alpha_kj_km_k)$ 的 $(\alpha_kj_k)$ 全部相异时，对由 $D(j_1)\times\cdots\times D(j_n)=\sum g_JD(J)$ 决定的每个 $\alpha,J,M$（$\alpha$ 是区别 $g_J$ 个相同 $J$ 状态的数）作关于 $m_k$ 組的近似函数

$$\phi(\alpha,\ j_1\cdots j_nJM)=\sum_{m_1,\cdots,m_n}\phi_1(\alpha_1j_1m_1)\cdots\phi_n(\alpha_nj_nm_n)\cdot\langle\alpha_1\cdots\alpha_nj_1m_1\cdots j_nm_n|\alpha JM\rangle, \qquad (26.2)$$

这里 $m_k$ 滿足条件：$M=m_1+\cdots+m_n$。再把上式按(19.9)对称化，就可以得到所求的基底：

$$\psi_{ik}([\lambda],\ \alpha,\ j_1\cdots j_nJM)$$
$$(i,\ k=1,\ 2,\ \cdots f_\lambda,\ -J\leqslant M\leqslant J). \qquad (26.3)$$

如果把角动量 $j_1,\ j_2,\ \cdots,\ j_n$ 按照这样的顺序依次合成，就可以把(26.2)的变换系数 $\langle\cdots|\cdots\rangle$ 用 Wigner 系数表示。

但是在 $j^n$ 配置的場合，在 $m_1,\ \cdots,\ m_n$ 里不可能有两个（原子及 $jj$ 核）或4个（$LS$ 核）以上相等的，所以可能的 $m_k$ 的組数就减少了。同时，相等的 $m_k$ 的置換必須用1表示，所以 $R[\lambda]$ 的阶数就不能完全使用。因为有这些限制，作出(26.3)就复杂了。

但是相反地，有时也能使問題簡单化。这就是在 $j^n$ 配置中 $([\lambda],\ J)$ 状态只出現一次的情况。这时不用去求状态的基底，也能求能量的值（Slater 求和法）。

对 $M$ 的某个特定值，令满足 $\sum m_k=M$ 的 $m_1,\ \cdots,\ m_n$ 的組为 $\{m_k^a\},\ \{m_k^b\},\ \cdots,\ \{m_k^c\}$；把 $\phi^a=\prod_k\phi_k(m_k^a)$，$\phi^b=\prod_k\phi_k(m_k^b)$，$\cdots$，$\phi^c=\prod_k\phi_k(m_k^c)$ 按照 $D[\lambda]$ 对称化，令对于所得函数（$R[\lambda]$ 的基底）

的能量 $H$ 的矩陣为

$$\begin{bmatrix} H^{aa} & H^{ab} & \cdots & H^{ac} \\ H^{ba} & H^{bb} & \cdots & H^{bc} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ H^{ca} & H^{cb} & \cdots & H^{cc} \end{bmatrix}. \tag{26.4}$$

这里 $H^{ab}$ 等都是依照(19.6),(20.10)作出的。如果把基底变化成($[\lambda]$, $J$),矩陣(26.4)就成为

$$\mathrm{diag}[E(J_1), E(J_2), \cdots, E(J_g)]. \tag{26.5}$$

这里 $J_1$, $\cdots$, $J_g$ 是在 $j^n[\lambda]$ 里出現的 $J$,而且都不小于 $M$. 因为上述的基底变換都是么正变换,所以对角綫上的和是不变的:

$$\sum_r E(J_r) = \mathrm{Sp}(H^{aa}) + \mathrm{Sp}(H^{bb}) + \cdots + \mathrm{Sp}(H^{cc}). \tag{26.6}$$

如果 $\{m_k^a\}$ 里沒有相等的,则由(19.11)得

$$\mathrm{Sp}(H^{aa}) = \sum \chi_\lambda(P) H_{aa}(P), \quad H_{aa}(P) = (\phi^a, HP\phi^a),$$

如果有相等的,則依照(20.10)把上式改写后使用。当 $H$ 只由1体坐标及2体坐标决定时,則

$$H = \sum_i f(x_i) + \sum_{i<j} g(x_i, x_j), \tag{26.7}$$

如果在 $\{m_k^a\}$ 中沒有相等的,則在 $H(P)$ 中除去 $P = I$(单位元素),$(ij)$(对换)外,有 $H(P) = 0$. 从而

$$H^{aa} = H(I)E + \sum_{i<j} V(ij) H(ij). \tag{26.8}$$

这里

$$H(I) = (\phi^a, H\phi^a) = \sum_k I(m_k) + \sum_{j<k} J(m_j m_k),$$

$$H(ij) = (\phi^a, H(ij)\phi^a) = \sum_{j<k} K(m_j m_k),$$

$$I(m_k) = (\phi(m_k), f\phi(m_k)),$$

$$J(m_j m_k) = (\phi_1(m_j)\phi_2(m_k), g_{12}\phi_1(m_j)\phi_2(m_k)),$$

$$K(m_j m_k) = (\phi_2(m_j)\phi_1(m_k), g_{12}\phi_2(m_j)\phi_1(m_k)).$$

在 $\{m_k^a\}$ 里,最初的 $p$ 对是同一的 $m_k$ 时,即

$$\{m_k^a\} = \{m_1, m_1, \cdots, m_p, m_p, m_{p+1}, \cdots, m_n\}$$

时，对于阶数为 $2^p$ 的群 $\{(12),\ (34),\ \cdots,\ (2p-1,\ 2p)\}$ 的元素 $T$，$T'$ 有

$$H(TPT')=H(P)$$

成立。而且基底须乘以归一化因子 $1/\sqrt{2^p}$。考虑对于 $P=I$ 及 $(ij)$ 不同的 $TPT'$ 的个数，而令 $\mu,\ \nu\leqslant 2p,\ i,\ j>2p$，则可得相当于(26.8)的关系式：

$$\begin{aligned}2\sum I(m_\nu)+\sum_i I(m_i)+\sum_\nu J(m_\nu m_\nu)+4\sum_{\nu<\mu}J(m_\nu m_\mu)\\ +2\sum_{\nu,i}J(m_\nu m_i)+\sum_{i<j}J(m_i m_j)-\sum_{\nu,i}K(m_\nu m_i)\\ +\sum_{i<j}V'(ij)K(m_i m_j).\end{aligned}\tag{26.9}$$

但是 $V'(P)$ 是 $S_{n-2p}$ 的表象矩陣，除去最后項，省略了其阶数的单位矩陣 $E$。而且这里还应用了(20.4)的 $V'(\nu i)=-\dfrac{1}{2}$ 的結果。矩陣的对角綫的和可由 $\mathrm{Sp}(V(ij))=\chi(ij)$，$\mathrm{Sp}(V'(ij))=\chi'(ij)$ 关系求得。

**例**　$p^3$(原子)。有 $S=3/2,\ 1/2$ 或 $[1^3]$，$[2,\ 1]$ 的对称状态，对每个状态，有 $S,\ D,\ P\ (L=0,\ 2,\ 1)$ 出現。对于 $M=m_1+m_2+m_3$ 的可能組合，如左表所示。对于 $S=3/2$(4重項)$[1^3]$，为了是反对称的，只剩下 $M=0$。除去 $I(1)+I(0)+I(-1)$ 是共通的(因为 $V(ij)=-1$)，其能量为

| $M$ | $(m_1m_2m_3)$ |
|---|---|
| 2 | (110) |
| 1 | (11−1), (001) |
| 0 | (10−1) |

$$J(10)+J(1-1)+J(00)-(K(10)+K(1-1)+K(00)).$$

利用前章的結果可得

$$E(^4S)=3F_0-15F_2\quad (F_0=F^0,\ F_2=F^2/25).$$

在 $S=\dfrac{1}{2}$(2重項)，[21]里对于 $M=2,\ 1$ 同一的 $m$ 都被包含两次，所以只取(12)由1表示的部分，能量的和为

$$J(11)+2J(10)-K(10),$$

$$J(11)+2J(1-1)-K(1-1)+J(00)+2J(01)-K(01),$$

由第一式得

$$E(^2D)=3F_0-6F_2,$$

又因为

$$E(^2D)+E(^2P)=6F_0-6F_2,$$

由第二式得

$$E(^2P)=3F_0.$$

对于 $M=0$，由于表象是2阶的，取对角綫的和而利用：$\chi(1)=2$，$\chi(12)=0$，則得

$$2\{J(10)+J(1-1)+J(0-1)\}=6F_0-6F_2=E(^2D)+E(^2P).$$

而此即为前节結果的驗算。

同一的 $J$ 在 $[\lambda]$ 状态里出現两次以上时，上面的計算只能給出能量的和（或平均值）。为了分别計算，需要施行变换(26.3)。为了把这个变换有組織地进行，必須导入由来系数 cfp. 对于求特定的 $j^n$，用下面的方法較方便。假定在 $J_1, \cdots, J_h$ 里有出現两次以上的（$J_h$ 至少两次），作关于 $M=J_h$ 的 $J^2=(\sum J_\alpha)^2=\sum\limits_\alpha J_\alpha^2+2\sum\limits_{\alpha<\beta} J_\alpha J_\beta$ 矩陣（在(26.4)里以 $L^2$ 代替 $H$），由于

$$2J_\alpha J_\beta=(J_{\alpha x}+iJ_{\alpha y})(J_{\beta x}-iJ_{\beta y})+(J_{\alpha x}-iJ_{\alpha y})(J_{\beta x}+iJ_{\beta y})$$
$$+2J_{\alpha z}J_{\beta z}=J_\alpha^+J_\beta^-+J_\alpha^-J_\beta^++2J_{\alpha z}J_{\beta z},$$

所以由

$$J^+\phi(m)=\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\cdot\phi(m+1),$$
$$J^-\phi(m)=\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\cdot\phi(m-1),$$
$$J_z\phi(m)=m\phi(m),$$

容易求得 $(L^2)^{aa}$，……. 而已知 $J_\alpha^2$ 的本征值为 $J_\alpha(J_\alpha+1)$，若令

$$(L^2)=\begin{bmatrix}(L^2)^{aa} & (L^2)^{ab}\cdots\\ (L^2)^{ba} & (L^2)^{bb}\cdots\\ \cdots\cdots & \cdots\cdots\end{bmatrix},$$

利用 $(L^2)x=J_\nu(J_\nu+1)x$ $(\nu=1, 2, \cdots\cdots)$ 求出 $x(x_1, x_2, \cdots\cdots)$，再根据 $|x_1|^2+|x_2|^2+\cdots\cdots=1$ 来归一化，就可順次求得变换矩陣 $S$ 的各列（把么正条件使用于驗算）。这样 $S^{-1}HS$ 就是关于 $J$ 的阶段矩陣，所以只要解关于出現两次以上的 $J$ 的部分的本征方程，就可以求得关于各个 $J$ 的能量值。

# 参考文献

## 回轉群

E. P. Wigner: Gruppentheorie and ihre Anwendung (Friedrich Vieweg, Braunschweig, 1931).

E. U. Condon and G. H. Shortley: Theory of Atomic Spectra (Cambridge, 1935).

E. Cartan: Leçons sur la Théorie des Spineurs (Hermann, paris, 1938).

山内恭彦：回轉群及其表象（回轉群とその表現）(岩波书店，1957).

M. E. Rose: Elementary Theory of Angular Momentum (Wiley, New York, 1957).

## 对称群

H. Weyl: Gruppentheorie und Quantenmechanik (Hirzel, 1931).

F. D. Murnaghan: The Theory of Group Representations (Baltimore, 1938).

D. E. Littlewood: The Theory of Group Characters (2nd ed., Oxford, 1950). 这本书里列举了很多参考文献。

本丛书第9，10卷月报‘岩堀氏与杉浦氏的对話’。

关于不可約表象矩陣的具体构成和数値表：

M. Kotane et al: Tables of Molecular Integrals (Maruzen, 1955).

T. Yamanouchi: Proc. Phys.-Math. Soc. Japan, 18 (1937), 436; 18 (1936), 623; J. Phys. Soc. Japan, 3 (1948), 245.

此外請参照本丛书《代数学》，《李群論》以及其中列举的文献。